



No d'ordre 2482

## THESE

présentée

pour obtenir

LE TITRE DE DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE

**École doctorale : Sciences de l'Univers, Espace, Environnement**

**Spécialité : Modélisation en hydrologie et hydrogéologie**

**par : Ahmad AL BITAR**

Titre de la thèse

**Modélisation des écoulements en  
milieu poreux hétérogènes 2D / 3D, avec  
couplages surface / souterrain et densitaires**

Soutenue le      lundi 4 juin 2007      devant le jury composé de :

M.	Philippe RENARD	Professeur, CHYN Neuchâtel	Président, Rapporteur
MM.	Rachid ABABOU	Professeur, IMFT Toulouse	Directeur de thèse
	Claudio PANICONI	Professeur, INRS-ETE Québec	Rapporteur
	Philippe ACKERER	Professeur, IMFS Strasbourg	Rapporteur
	Javier ELORZA	Professeur, ETSI Minas - Madrid	Membre
	Manuel MARCOUX	Maître de Conf., IMFT Toulouse	Membre
	Bernard CAUSSADE	DR Honoraire CNRS	Invité
	Gérard DEDIEU	Ing. CNES, CESBIO Toulouse	Invité
	Jean-Michel TANGUY	Ing.-Chef P.C, Dir. SCHAPI Toulouse	Invité

## Résumé

Dans ce travail, on considère la modélisation des écoulements dans des hydro-systèmes comprenant des sols et des aquifères géologiquement complexes et hétérogènes. On considèrera par exemple le cas d'un aquifère côtier soumis à l'intrusion saline, avec couplage densitaire (eau douce / eau salée), phénomène auquel peuvent se greffer d'autres couplages (écoulements à saturation variable, couplages surface / souterrain). On choisit une approche ayant les caractéristiques suivantes :

- ◆ le modèle est spatialement distribué afin de représenter l'hétérogénéité du milieu ;
- ◆ le modèle est fortement couplé afin d'appréhender les écoulements dans leur complexité physique.

On utilise dans ce but un modèle fortement intégré, à une seule équation générique de type EDP, basée sur une loi de Darcy généralisée permettant de décrire différents « régimes » d'écoulements la co-existant dans un même domaine, tout en conservant robustesse et efficacité.

Le travail est divisé en trois parties.

Dans une première partie on élabore un nouveau modèle numérique 3D, pour la modélisation des écoulements en milieux poreux à densité variable dans l'hypothèse d'une interface abrupte. Ce nouveau modèle est basé sur des relations 'effectives' non linéaires de saturation et de perméabilité, dans une équation d'écoulement de type Richards modifiée.

La seconde partie correspond à l'élaboration et l'implémentation d'un modèle verticalement intégré d'intrusion saline en aquifère côtier, permettant d'étudier l'effet de l'hétérogénéité stochastique de l'aquifère. Le modèle, basé sur l'hypothèse 'interface abrupte', est implémenté comme un module '2D' dans le code volumes finis BIGFLOW 2D/3D. Le nouveau module 2D est utilisé pour analyser la variabilité de l'interface eau douce / eau salée par simulations stochastiques de type Monte Carlo à échantillonnage spatial (réalisation unique). Ces résultats sont comparés à nouvelle théorie, où l'interface aléatoire auto-corrélée est analysée par transformation de variable, combinée à une méthode de perturbation et à une représentation spectrale (Fourier / Wiener-Khinchine).

Dans la troisième et dernière partie, on présente un modèle de couplage fortement « intégré » pour la modélisation des écoulements de surface et souterrain en hypothèses d'écoulement plan, verticalement hydrostatique. On s'intéresse au cas d'une vallée fluviale avec cours d'eau, plaine d'inondation, et nappe d'accompagnement. L'écoulement en surface est modélisé par l'équation d'onde diffusante et l'écoulement souterrain par l'équation de Dupuit-Boussinesq. Ce modèle couplé est appliqué à la vallée fluviale de la Garonne dans la région de Toulouse - Moissac (France). Cette application a nécessité l'élaboration d'une méthode d'interpolation géostatistique adaptée à l'élaboration d'un Modèle Intégré Numérique de Terrain ('MINT'), de façon à inclure le fond de la rivière au MNT topographique en haute résolution. Enfin, au-delà de cette application particulière, le modèle d'écoulement couplé surface / souterrain est généralisé au cas d'un couplage densitaire eau douce / eau salée, lorsque la nappe est sujette à l'intrusion saline au voisinage d'une embouchure ou d'un estuaire.

### Mots Clés

Intrusion saline	Modélisation stochastique	Couplage surface/souterrain
Milieu poreux et hydrogéologie	Aquifère et nappe souterraine	Volumes finis 2D / 3D
Modèle Intégré Numérique de Terrain (MINT, MNT)		Loi de Darcy Ward
Equation de Richards	Equation de Dupuit-Boussinesq	Equation d'onde diffusante

## Abstract

In this work, we consider water flow modeling in hydro-systems that include geologically complex and heterogeneous soils and aquifers, e.g., a coastal aquifer undergoing seawater intrusion, with density coupling (freshwater / saltwater), along with other coupled phenomena (variable saturation, surface / subsurface coupling). The selected approach has the following characteristics:

- ◆ the model is spatially distributed in order to represent the heterogeneity of the medium
- ◆ the model is strongly coupled in order to apprehend the physical complexity of flow systems

We use for this purpose a strongly integrated model, governed by a single generic equation (PDE) based on generalized Darcy law, to describe different flow ‘regimes’ co-existing in the same domain, while conserving robustness and efficiency.

The work is divided into three parts:

In the first part, we develop a new 3D numerical model for variable density flow in porous media under the sharp interface approximation. This new model is based on non-linear ‘effective’ saturation and conductivity relations, in a modified Richards flow equation.

The second part corresponds to the development and implementation of a vertically integrated saltwater intrusion model, to study the effect of stochastic heterogeneity in a coastal aquifer.

The model, based on the sharp interface hypothesis, is implemented as a 2D module in the finite volumes code BIGFLOW 2D/3D. The new module is used for analyzing the variability of the salt / fresh interface through Monte Carlo simulations with spatial sampling (single realization). These results are compared to a new theory where the random field interface is analyzed via a transformation combined to a perturbation method and a spectral representation (Fourier / Wiener-Khinchine).

In the third and last part, we present a strongly integrated model to simulate coupled surface / subsurface plane flows, such as a river valley with stream, floodplain, and free surface aquifer. Surface flow is modeled via the diffusive wave equation, and subsurface flow is modeled using the Dupuit-Boussinesq equation. This coupled model is applied to the Garonne river valley in the Toulouse-Moissac region (France). This application has required the elaboration of a geostatistical interpolation technique that produces an Integrated Digital Elevation Model (‘IDEM’). The IDEM incorporates a high resolution representation of river channels into the topographic DEM. Finally, beyond this specific application, the coupled surface / subsurface model is generalized to the case of salt / fresh density coupling, where the aquifer is subject to saltwater intrusion near a river mouth or an estuary.

### Keywords

Saltwater intrusion	Stochastic modeling	Surface / subsurface coupling
Porous media & hydrogeology	Groundwater & aquifers	Finite volumes 2D / 3D
Integrated Digital Elevation Model (IDEM, DEM)		Darcy-Ward law
Richards equation	Dupuit-Boussinesq equation	Diffusive wave equation

## Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier en premier lieu mon directeur de thèse, Rachid Ababou, pour son soutien scientifique. Ses conseils promulgués durant ma thèse m'ont permis d'élargir mes horizons. Je n'oublie pas aussi sa chaleur humaine qui m'a beaucoup touché.

Je remercie aussi les membres du jury devant lesquels j'ai eu l'honneur de présenter ma thèse.

Messieurs Philippe Renard, Philippe Ackerer, Claudio Paniconi ont accepté de juger ce travail en tant que rapporteurs, et je les en remercie. Ils ont contribué par leurs nombreuses remarques et suggestions à améliorer la qualité de ce mémoire, et je leur en suis très reconnaissant.

J'adresse mes remerciements à Messieurs Gérard Dedieu, Jean-Michel Tanguy et Bernard Caussade. Leur regard externe et leurs questions pertinentes durant ma soutenance m'ont permis d'élargir mes réflexions au delà de mon sujet de thèse.

Mes remerciements vont également à Monsieur Michel Quintard pour m'avoir accueilli au sein de l'équipe GEMP de l'IMFT, et pour m'avoir fait découvrir les karsts des gorges du Tarn ! Je n'oublie pas les membres de l'équipe GEMP et les doctorants de l'IMFT.

Je remercie aussi l'équipe du Centre d'Hydrogéologie de l'Université de Neuchâtel en Suisse pour m'avoir accueilli chez eux pendant deux mois. Je remercie spécialement Philippe, Jawher, et Ellen.

Merci à l'équipe LEH Laboratoire d'Ecologie des Hydrosystèmes du CNRS pour les données du site de Monbéqui.

Ce travail n'aurait pas pu aboutir sans la bourse de thèse du Ministère de l'Education et sans le soutien financier du projet européen SWIMED.

Mes remerciements les plus affectueux vont à ma femme Hanaa, mes parents et mes trois sœurs qui m'ont toujours soutenu dans mes choix.

## TABLE DES MATIERES

<b>Chapitre I</b>	<b>Introduction .....</b>	<b>1</b>
<b>I - 1</b>	<b>Contexte.....</b>	<b>3</b>
I - 1.1	Les défis .....	3
I - 1.2	Modélisation des transferts.....	4
I - 1.3	Hétérogénéité, milieux aléatoires, et géostatistique .....	4
I - 1.4	Modélisation stochastique .....	5
I - 1.5	Types d'écoulements, types de milieux, et lois phénoménologiques .....	6
<b>I - 2</b>	<b>Objectifs de la thèse.....</b>	<b>8</b>
<b>I - 3</b>	<b>Plan de la thèse.....</b>	<b>9</b>
<b>Chapitre II</b>	<b>Modélisation des écoulements à densité variable .....</b>	<b>11</b>
<b>II - 1</b>	<b>Notions de base.....</b>	<b>13</b>
II - 1.1	Volume Elémentaire Représentatif (VER) .....	13
II - 1.2	Définitions .....	13
II - 1.3	Notion de charge hydraulique.....	14
<b>II - 2</b>	<b>Ecoulement en milieu poreux .....</b>	<b>15</b>
II - 2.1	Equation de conservation de masse .....	15
II - 2.2	Equation de conservation de la quantité de mouvement – Loi de Darcy .....	16
II - 2.3	Critiques et limitations de la loi de Darcy .....	17
II - 2.4	Écoulements 3D variablement saturés à densité constante .....	17
II - 2.5	Écoulements 3D saturés à densité constante.....	21
II - 2.6	Ecoulement 2D en nappes à densité constante- Dupuit .....	21
II - 2.7	Méthodes de résolution numérique.....	23
<b>II - 3</b>	<b>Modélisation des écoulements à densité variable.....</b>	<b>24</b>
II - 3.1	Densité et concentration .....	24
II - 3.2	Approches avec zone de mélange (diffusion).....	24
II - 3.3	Approches avec interfaces abruptes (sans diffusion).....	29
II - 3.4	Discussions sur les approches de modélisation .....	35
<b>II - 4</b>	<b>Classification des modèles hydrogéologiques.....</b>	<b>35</b>
<b>Chapitre III</b>	<b>Développement d'un modèle 3D d'intrusion saline avec interface abrupte et zone salée quasi-statique .....</b>	<b>37</b>
<b>III - 1</b>	<b>Introduction .....</b>	<b>39</b>
<b>III - 2</b>	<b>Formulation en 3D de l'intrusion saline avec zone salée quasi-statique.....</b>	<b>39</b>
III - 2.1	Equations de conservation de masse et de conservation de QDM.....	39
III - 2.2	Conditions dynamiques au niveau de l'interface .....	39
III - 2.3	Hypothèse d'une zone salée quasi-hydrostatique .....	41
<b>III - 3</b>	<b>Développement et paramétrisation d'un modèle de propriétés hydrauliques non-linéaires équivalentes pour l'intrusion saline .....</b>	<b>41</b>
III - 3.1	Zones d'écoulement.....	41
III - 3.2	Courbes de rétention et de conductivité.....	42
III - 3.3	Capacité et Diffusivité .....	44
<b>III - 4</b>	<b>Solution numérique au problème de l'anti-diffusion .....</b>	<b>45</b>
III - 4.1	Courbe de rétention modifiée .....	45

III - 4.2	Courbe de conductivité modifiée.....	47
<b>III - 5</b>	<b>Validation avec la solution analytique de Glover 1964.....</b>	<b>48</b>
III - 5.1	Configuration du problème.....	50
III - 5.2	Position de l'interface.....	50
III - 5.3	Courbes de rétention.....	51
<b>III - 6</b>	<b>Comparaison avec le problème de Henry .....</b>	<b>52</b>
<b>III - 7</b>	<b>Conclusions .....</b>	<b>54</b>
<b>Chapitre IV</b>	<b>Modélisation stochastique de l'intrusion saline en 2D plan.....</b>	<b>55</b>
	<b>Random Field Approach to Seawater Intrusion in Heterogeneous Coastal Aquifers: Unconditional Simulations and Statistical Analysis .....</b>	<b>58</b>
	<b>Uncertainty analyses of seawater intrusion : numerical and stochastic approaches ....</b>	<b>71</b>
<b>Chapitre V</b>	<b>Modélisation 2D couplée surface / souterrain avec ou sans intrusion saline.....</b>	<b>78</b>
<b>V - 1</b>	<b>Introduction .....</b>	<b>80</b>
V - 1.1	Introduction .....	80
V - 1.2	Résumé du chapitre .....	80
<b>V - 2</b>	<b>Modèle d'onde diffusante 2D (hydraulique de surface) .....</b>	<b>81</b>
V - 2.1	Equations de Saint Venant 2D et coefficients de frottement .....	81
V - 2.2	Equation d'onde diffusive 2D et coefficients de frottement .....	82
<b>V - 3</b>	<b>Modèles écoulements d'écoulements couplés surface/souterrain (2D).....</b>	<b>86</b>
V - 3.1	Introduction et résumé .....	86
V - 3.2	Couplage surface-souterrain .....	86
V - 3.3	Formulation mathématique du modèle bi-couches surface/souterrain.....	88
V - 3.4	Formulation du modèle bicouches surface/souterrain avec intrusion saline.....	89
<b>V - 4</b>	<b>Tests onde diffusante et couplages surface/souterrain .....</b>	<b>90</b>
V - 4.1	Validation de l'onde diffusante Manning 1D permanent.....	90
V - 4.2	Ecoulements couplés en géométrie simplifiée.....	95
<b>V - 5</b>	<b>Génération d'un Modèle Numérique de Terrain Intégré (Garonne).....</b>	<b>100</b>
V - 5.1	Introduction .....	100
V - 5.2	Méthode Géostatistique .....	100
V - 5.3	MINT : Modèle Numérique Intégré de Terrain .....	103
V - 5.4	Méthodologie pour la construction d'un MINT.....	104
V - 5.5	Construction du MINT pour la Garonne.....	105
<b>V - 6</b>	<b>Simulation couplée du système nappe rivière de la Garonne (Toulouse-Moissac) .....</b>	<b>106</b>
V - 6.1	Echanges rivière-aquifère dans la Garonne .....	106
V - 6.2	Simulation couplée rivière-aquifère en 2D .....	107
<b>V - 7</b>	<b>Conclusions .....</b>	<b>110</b>
<b>Chapitre VI</b>	<b>Conclusions .....</b>	<b>112</b>
	<b>Références.....</b>	<b>117</b>
	<b>Annexes.....</b>	<b>126</b>

# Chapitre I INTRODUCTION

**TABLE DES MATIERES DU CHAPITRE I**

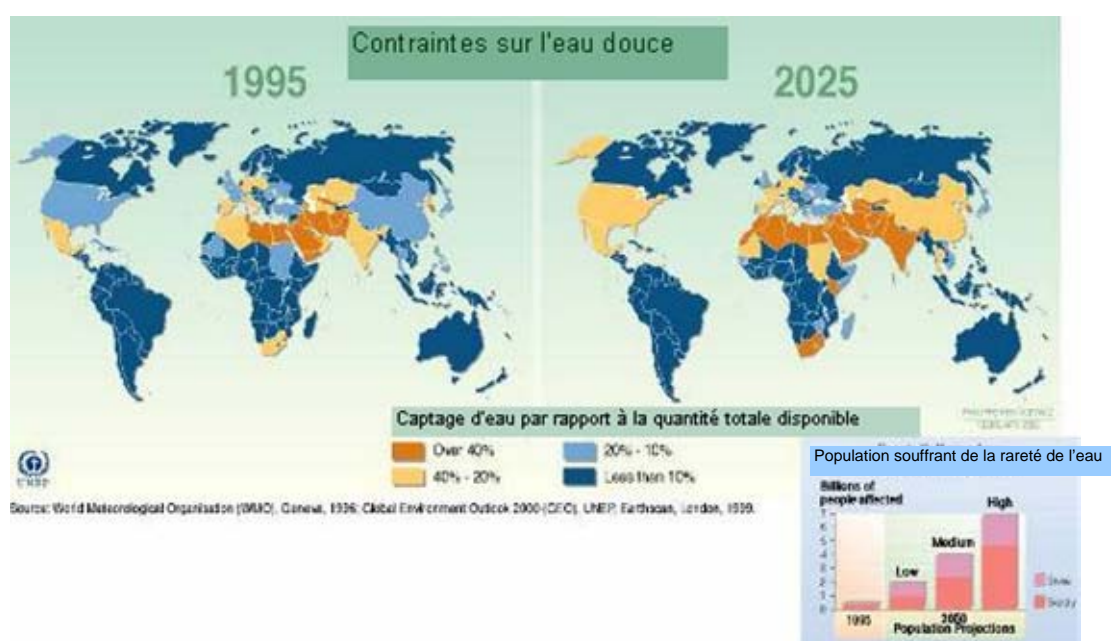
<b>I – 1</b>	<b>Contexte</b>	<b>3</b>
<b>I - 1.1</b>	<b>Les défis</b>	<b>3</b>
I - 1.2	Modélisation des transferts	4
I - 1.3	Hétérogénéité, milieux aléatoires, et géostatistique	4
I - 1.4	Modélisation stochastique	5
I - 1.5	Types d'écoulements, types de milieux, et lois phénoménologiques	6
<b>I – 2</b>	<b>Objectifs de la thèse</b>	<b>8</b>
<b>I – 3</b>	<b>Plan de la thèse</b>	<b>9</b>



## I - 1 CONTEXTE

### I - 1.1 Les défis

L'eau douce constitue 2.5 % de l'eau dans le globe, et 95% de l'eau douce utilisable est dans le sous sol. Ces chiffres montrent l'importance de cette source d'eau. Elle est d'autant plus importante si l'on considère la pénurie d'eau à laquelle le monde devra faire face dans le futur. Le nombre de pays touchés par la surexploitation (à plus de 40%) des eaux souterraines va significativement augmenter d'ici 2025 comme on le voit dans la figure 1.1. Les pays riches et moins riches devront faire face à ce problème. Ces chiffres globaux sont encore plus alarmants lorsqu'on considère la répartition inégale des ressources en eaux dans un même pays et à travers le temps, et si l'on considère la concentration démographique dans les grandes villes et sur les côtes. Cette surexploitation combinée aux changements climatiques majeurs conduira éventuellement à une raréfaction et une dégradation de la qualité des ressources en eaux.



**Fig. 1.1 Prévision des contraintes sur l'eau douce (WMO, 96).**

Les défis majeurs à prendre en compte en gestion des ressources en eaux sont : la déplétion des aquifères à cause de la surexploitation, l'abaissement du niveau de certaines rivières à cause des changements climatiques, l'assèchement des lacs, la salinification des sols à cause de la surexploitation agricole, la pollution des aquifères par les pesticides, les engrais et autres substances chimiques nocives, et l'intrusion saline. Cette dernière sera accrue par la surélévation du niveau de la mer et par la surexploitation des nappes côtières.

Ces différents problèmes font intervenir des hydro-systèmes complexes formés de « composantes » divers comme les rivières, les lacs, les eaux souterraines et la végétation. Les eaux souterraines peuvent elles-mêmes être constituées par un assemblage de différentes sous-composantes telles que : nappes phréatiques d'eau douce, nappes confinées plus ou moins profondes, zones côtières soumises à l'intrusion saline, sols non saturés, etc.

Ces composantes interagissent entre elles. Un abaissement du niveau des rivières conduira à un rabattement du niveau des nappes en plaine alluviale. Une surexploitation des nappes conduira à un abaissement du niveau des rivières. Ce type d'interaction dans les deux sens nécessite la considération d'un couplage fort entre les deux composantes. Ce couplage est encore plus complexe dans le cas d'un aquifère côtier connecté à la mer. Dans ce cas l'eau douce moins dense glisse en

dessus de l'eau de mer plus dense qui envahit l'aquifère sous la forme d'un biseau salé. Ces deux volumes d'eau interagissent aussi au niveau de la zone de transition qui se forme entre l'eau douce et l'eau salée.

Plusieurs travaux de recherches ont été consacrés à l'élaboration d'une approche globale de modélisation des écoulements ; citons parmi les plus récents : Putti *et* Paniconi (2004), Panday *et* Huyakorn (2004), Gunduz *et* Aral (2005), Kollet *et* Maxwell (2006). D'autres projets ambitieux sont en cours actuellement, comme le projet SEVE de couplage de codes hydrologiques. Ces approches, combinées à des études de scénarios basées sur des règles d'évolutions socio-économiques, permettront aux décideurs de gérer les risques de façon globale sur l'ensemble de l'écosystème afin de prendre les meilleures décisions avec la plus faible incertitude.

## I - 1.2 Modélisation des transferts

La description des composantes de l'hydrosystème à étudier doit se faire à l'aide de modèles mathématiques qui expriment, au minimum, les principes physiques de conservation de masse et de conservation d'énergie, mais ceci avec différents degrés de détail selon les modèles.

Plus précisément, les modèles varient en complexité, depuis les modèles « globaux » qui considèrent seulement des bilans globaux, aux modèles mécanistes et spatialement distribués, qui décrivent le comportement du système à l'aide d'Equations aux Dérivés Partielles (EDP) résolues à l'aide de méthodes qui sont numériques dans les cas les plus réalistes.

En résumé, on pourrait distinguer essentiellement deux types de modèles :

- Modèles mécanistes et distribués (EDP) ;
- Modèles « globaux », par exemple modèles réservoirs ou modèles de bilan (non distribués en espace) et s'appuyant sur des modèles phénoménologiques empiriques.

Cependant, cette ligne de séparation entre modèles distribués ou non, mécanistes ou non, est relativement floue et subjective, d'autant plus qu'actuellement, il devient possible de coupler de façon « hétérogène » ces différents types de modèles. Dans ce travail, nous privilégions l'approche distribuée (comme indiqué plus loin).

## I - 1.3 Hétérogénéité, milieux aléatoires, et géostatistique

En plus de l'interaction inter-composantes, plusieurs échelles d'hétérogénéité existent dans chacun de ces systèmes (intra-composante). Les milieux souterrains sont fortement hétérogènes, et incertains, parce qu'il est impossible de mesurer de façon déterministe leurs caractéristiques (Gelhar 1993). L'évaluation des caractéristiques se fait à l'aide de méthodes statistiques appliquées à des mesures multi supports (ponctuelles par perméamétrie, linéaires par forage, surfaciques par analyse de faciès). Trois types de méthodes statistiques sont utilisés pour la construction de milieux ou de surfaces hétérogènes :

- Les méthodes géostatistiques d'interpolation, de Krigeage (Delhomme J.P. 1979) ;
- La génération conditionnelle de milieux aléatoires (Matheron 1973, Tompson *et al.* 1989) ;
- La génération d'objets discrets aléatoires ou déterministes.

Les eaux de surface évoluent aussi dans des paysages fortement hétérogènes comprenant des 'objets' multiples (topographie, haies, parcelles, canaux, rivières, etc.). Une des informations nécessaires pour le couplage est la surface de séparation des composantes des écoulements (par exemple la topographie, le lit des rivières). La modélisation numérique de la topographie - hors réseaux hydrographiques - est facilitée par l'abondance de données mises à disposition (mesures topographiques, télédétections) et par les méthodes géostatistiques (interpolation statistique, krigeage) très adaptées à ce type de données.

Il n'en est pas de même pour les lits des rivières, qui sont essentiellement des « singularités » topographiques (lignes de courbure). Celles-ci devraient nécessiter des mesures particulièrement

denses. En pratique, on dispose de mesures qui ne recouvrent pas de façon suffisamment détaillée la topographie - ou bathymétrie - de la rivière. Dans beaucoup de cas les profils le long de la rivière sont très éloignés les uns des autres (plusieurs centaines de mètres). De telles contraintes exigent des méthodes d'interpolation adaptées à ce type de problème en vue de l'obtention d'un Modèle Numérique de Terrain (MNT). Lorsqu'un tel MNT résulte de l'intégration ou de la fusion de données variées (altimétries sur grilles régulières, altimétries ponctuelles, profils en travers, profils en longs), on pourrait parler plutôt de Modèle Intégré et Numérique de Terrain (MINT).

## I - 1.4 Modélisation stochastique

La prise en compte de l'hétérogénéité ou de l'incertitude sur les données dans les modèles est l'un des objectifs de l'hydrologie stochastique (Dagan 1989 ; Gelhar 1993 ; Zhang 2002). Une modélisation stochastique est nécessaire lorsque l'un ou plusieurs des paramètres du domaine sont traités comme une variable aléatoire, un processus stochastique, ou un champ aléatoire en espace. Par exemple, pour les aquifères hétérogènes, la perméabilité peut être considérée comme un champ aléatoire (Vanmarcke 1983). De plus, les conditions limites peuvent être décrites comme des processus stochastiques (précipitations, niveau de la mer...). Enfin, d'autres termes de forçages mal connus (par exemple le débit des puits de pompage) peuvent être considérés comme des variables aléatoires.

Sur le plan mathématique, la modélisation stochastique peut être formulée à différents niveaux du modèle, et recouvrir les méthodes suivantes (liste non exhaustive) :

- **Au niveau des modèles mathématiques (EDP stochastiques) :**

La résolution de ce type de problème demande l'utilisation de méthodes spéciales pour l'obtention des différents moments et corrélations entre la variable étudiée (par exemple la pression) et les variables aléatoires (par exemple la pression et la perméabilité) (Dagan 1989). Comme les moments dépendent les uns des autres, on obtient ainsi un système hiérarchique d'EDP à résoudre. Dans certains cas simples il est possible d'obtenir des solutions analytiques des moments d'ordre 1 et 2 à l'aide de méthodes perturbatives comme la méthode spectrale/Fourier, (Gelhar 1993) utilisée de façon modifiée dans le cadre de cette thèse au Chapitre 4. Dans les cas les plus complexes, des résolutions numériques sont nécessaires pour 'fermer' les 'équations' et calculer certaines 'statistiques' (moyennes, corrélations, moments de différents ordres).

- **Au niveau du modèle de résolution numérique :**

En appliquant une méthode de perturbation à la matrice globale du système à résoudre. Tang *et* Pinder (1979) utilise une méthode perturbative avec la méthode des différences finies pour faire une analyse d'incertitude des équations de transport en 1D. Cette méthode est aussi appliquée à la méthode des « éléments finis stochastiques » (Stochastic Finite Element Method - SFEM). Chaudhuri *et* Sekhar (2005) présentent une amélioration à cette méthode perturbative et la comparent aux simulations de Monte Carlo (voir ci-dessous). Ce type de méthode n'a pas été utilisé ici.

- **Au niveau de la simulation (Monte Carlo) :**

Basée sur des algorithmes dits de « Monte Carlo », cette méthode consiste à générer un ensemble de répliques de milieux aléatoires, conditionnels ou non, qui obéissent à des règles statistiques prédéfinies (moyenne, écart-type, structure spatiale d'hétérogénéité, longueur de corrélation). Pour générer ces milieux, on peut utiliser une des méthodes statistiques présentées plus haut (« hétérogénéité, milieux aléatoires, géostatistique »). Par exemple, dans ce travail (Chapitre 4) nous avons généré des milieux inconditionnels. Le choix du nombre de répliques générées dépend de la taille et de l'hétérogénéité du milieu (longueur de corrélation par rapport à la taille du domaine). Des simulations numériques sont ensuite effectuées à l'aide de codes de calcul déterministes (dans le cadre de cette étude le code BIGFLOW a été utilisé) sur un sous-

ensemble ou sur la totalité des réalisations générées. Enfin une reconstitution des moments de la variable d'intérêt est effectuée à partir des résultats des simulations numériques. Plusieurs milliers de réalisations sont nécessaires pour obtenir de bonnes estimations statistiques sur les moments.

## I - 1.5 Types d'écoulements, types de milieux, et lois phénoménologiques

Nous définissons à ce stade quelques notions de base qui seront développées et utilisées dans les chapitres suivants de ce travail. Ces notions ont été évoquées pour leur majorité dans Ababou et Al-Bitar (2007). Certaines de ces notions sont originales, par exemple :

- ◆ milieux macroporeux 3D cinétiques et dynamiques ;
- ◆ anisotropie dans la loi généralisée de Darcy/Forchheimer ; et
- ◆ approche 3D de l'intrusion saline en interface abrupte.

D'autres sont des notions plus classiques que l'on peut retrouver dans de nombreuses références telles que Bear (1972), Bear (1988), Freeze et Cherry (1979), de Marsily (1986), entre autres.

- **Ecoulement saturé :**

Ecoulement en milieu poreux saturé avec une porosité effective totalement remplie d'eau.

- **Ecoulement non-saturé :**

Ecoulement en milieu non saturé, la porosité étant seulement partiellement remplie d'eau et le reste d'air. La résistance à l'écoulement de l'air est négligée et la pression de l'air est en équilibre avec la pression de l'atmosphère en permanence. Les équations classiques régissant l'écoulement non saturé (sans saturation variable) sont les équations de Richards (Richards 1931).

- **Ecoulement variablement saturé :**

L'eau s'écoule dans un milieu partiellement saturé, i.e., contenant des zones saturées et d'autres zones non saturées. Dans le cas général, plusieurs zones saturées et non saturées peuvent co-exister, et leurs distributions spatiales peut évoluer dans le temps, e.g.: écoulement partiellement saturé avec front infiltration descendant vers la surface libre d'une nappe (Freeze 1971 ; Vauclin *et al.* 1979). Afin de modéliser l'écoulement en milieu partiellement saturé dans un seul domaine et avec une seule équation, l'équation de Richards est reformulée en variables mixtes et sous forme conservative, avec deux variables d'état, la teneur en eau et la pression : voir Ababou *et al.* (1988, 1992) et Celia *et al.* (1990), parmi d'autres.

- **La loi de Darcy, la perméabilité et la charge hydraulique :**

La loi de Darcy exprime la proportionnalité entre la densité de flux  $\mathbf{q}$  [ $L T^{-1}$ ] à travers un milieu poreux et le gradient de charge hydraulique dans le milieu poreux. Notons que la vitesse de l'eau est donnée par  $\mathbf{V} = \mathbf{q}/\theta$ , où  $\theta$  est la porosité (ou la teneur en eau). La perméabilité [ $m^2$ ], intrinsèque au milieu poreux, exprime l'inverse de la résistance visqueuse au flux. La conductivité hydraulique [ $m/s$ ] exprime la même chose, mais elle dépend du fluide (eau). Dans la zone non saturée, la loi de Darcy est de la même forme –quasi linéaire – avec une conductivité hydraulique fonction de la pression ou la teneur en eau. Parmi les références historiques liées à ce paragraphe nous citons par exemple Darcy (1856); Buckingham (1907); Richards (1931).

- **Milieux macroporeux 'dynamiques' et 'cinétiques' :**

Un milieu macroporeux peut être considéré comme un milieu ouvert, une couche superficielle de sol couvert de végétation dense, ou un banc de galet, etc. Dans le code de calcul BIGFLOW par exemple, ce type de milieu est représenté comme un milieu poreux à pores grossiers et à

forte perméabilité, allant à l'extrême vers une perméabilité quasi-infinie et une porosité de 100% dans certains sous domaines (Ababou *et al.* 1996, 1998, 2002, 2006 ; Trégarot 2000). Comme expliqué dans les références précitées, cette approche originale conduit à prendre en compte explicitement deux effets distincts pour les écoulements en macroporeux à saturation variable :

- a) **Effets dynamiques** : à cause du fort nombre de Reynolds, la perte de charge n'est plus linéaire, les effets inertiels deviennent importants, et la loi de Darcy est remplacée par la loi quadratique en vitesse de Ergun-Ward-Forchheimer (e.g., Ward 1964) ;
- b) **Effets cinétiques** : la courbe de rétention teneur en eau / pression est une fonction escalier (ou quasi-escalier, vue la discrétisation numérique), conduisant à une imbibition ou drainage instantané de la porosité en tout endroit où une surface libre existe.

- **Ecoulements plans de Dupuit-Boussinesq :**

En considérant un écoulement verticalement hydrostatique quasi plan, l'équation de masse et la loi de Darcy peuvent être intégrées verticalement pour obtenir l'équation de Dupuit-Boussinesq en écoulement plan (x,y). Les variables d'état deviennent : la charge hydraulique moyenne  $H$  [m], et le flux spécifique en 2D  $Q$  [ $L^2 T^{-1}$ ]. La seconde variable provient de l'intégration de la vitesse de Darcy. Dans ce cas, la zone non saturée est négligée (réponse instantanée de la surface libre au processus d'imbibition et de drainage). Le coefficient de drainage est la porosité effective. Cette approche se base sur les travaux de Dupuit (1863) et Boussinesq (1904).

- **Ecoulements plans de Saint-Venant :**

Les équations 2D de Saint-Venant (Saint Venant, 1871) sont une approximation verticalement hydrostatique et verticalement intégrées de Navier-Stokes (équations de conservation de masse et de quantité de mouvement) dans le cas d'écoulement hydraulique à surface libre en canaux, rivières, plaines d'inondation, etc. Les variables considérées sont le vecteur de vitesse de l'eau en 2D,  $V$  [ $L T^{-1}$ ], et la hauteur d'eau "H" ou la lame d'eau "h". La formulation 1D des équations de Saint-Venant est largement utilisée en hydrologie de surface pour décrire les écoulements transversalement intégrés le long des rivières et des canaux.

- **Ecoulements plans d'Onde Diffusante et couplage nappe-rivière :**

L'équation 2D d'onde diffusante (cinématique et diffusive) est une simplification supplémentaire de l'équation de Saint-Venant (et donc de Navier-Stokes), valide seulement pour des écoulements à vitesse lentement variée et suffisamment faible pour que les termes inertiels soient négligeables. Il existe une version 1D pour les écoulements en canal, tandis que la version 2D est utilisable pour décrire les ruissellements et inondations de surfaces en (x,y) – ce qui est d'intérêt dans notre travail sur le couplage surface/souterrain. En effet, l'idée est de coupler un écoulement de surface avec un écoulement souterrain peu profond en utilisant l'onde diffusante pour l'eau de surface et l'équation de Boussinesq pour l'eau souterraine. Voir Chow *et al.* (1988) ou Bedient *et al.* (2002) pour une présentation « basique » du modèle d'onde diffusante ; ces auteurs présentent aussi des tables de valeurs des coefficients de rugosités correspondants.

- **Anisotropie :**

Les milieux poreux et macroporeux naturels peuvent être fortement anisotropes. Cependant, la définition de l'anisotropie dépend aussi de la résolution spatiale du modèle. Par exemple, l'anisotropie d'un milieu stratifié n'est pas importante si le modèle d'écoulement est implémenté avec une résolution plus fine que l'épaisseur des strates. La loi de Darcy peut être formulée avec une perméabilité anisotrope avec un tenseur symétrique du second ordre.

Dans le modèle numérique BIGFLOW, le tenseur est supposé diagonal, mais une rotation peut être appliquée au domaine de calcul par rapport au système de référence « horizontal/vertical ». Le modèle équationnel de BIGFLOW prend en compte l'anisotropie dans plusieurs formes de la

loi de Darcy : ainsi dans le modèle 2D plan, la transmissivité et le coefficient de rugosité sont anisotropes ; pour les écoulements 3D macroporeux à grand Reynolds, la loi quadratique en vitesse (Ward-Forchheimer) peut aussi être anisotrope, comme indiqué dans Trégarot (2000), d'après Knupp *et* Lage (1995).

- **Écoulements à densité variable en milieux poreux (et hypothèse d'interface abrupte) :**

Un écoulement en milieu poreux est à densité variable lorsque la densité dépend de la position et du temps, notamment à travers d'autres variables d'état (telles que concentration, température, etc.). On s'intéresse ici au cas de l'intrusion saline en nappe côtière, où la concentration de l'eau en sel affecte l'écoulement. L'eau est le fluide porteur (solvant), et le sel est le soluté. Ce problème pourrait être décrit par deux équations : une équation d'écoulement d'eau et une équation de transport advectif / diffusif de sel. Cependant, on peut mettre en oeuvre une version simplifiée en utilisant l'hypothèse « interface abrupte ».

- **Écoulements à densité variable en milieux poreux avec hypothèse d'interface abrupte :**

Dans le modèle d'interface abrupte, on considère un écoulement à densité variable défini par deux zones fluides de densités distinctes séparées par une interface abrupte. En effet, à grande échelle et pour de faibles contrastes de densité (aquifères côtiers), et étant donné la variabilité temporelle des forçages hydrologiques (marées, précipitations, etc.), l'épaisseur de la zone de transition due à la diffusion pure de sel entre l'eau de mer et l'eau douce est relativement petite par rapport à la taille du domaine, et par rapport à la variabilité importante due à l'hétérogénéité intrinsèque du milieu. C'est cette approche « interface abrupte » qui est utilisée dans le cadre de cette thèse, l'une verticalement intégrée, et l'autre, relativement novatrice, tridimensionnelle.

## I - 2 OBJECTIFS DE LA THESE

Dans ce travail, on considère la modélisation des écoulements dans un hydro-système comprenant un aquifère géologiquement « complexe » (naturellement hétérogène) et en particulier un aquifère côtier soumis à l'intrusion saline (couplage eau douce / eau salée), auxquels peuvent se greffer d'autres couplages (écoulements à saturation variable et couplages surface souterrain). Une approche de modélisation spatialement distribuée est nécessaire pour appréhender ces phénomènes dans leur complexité physique et géométrique.

Afin de faire un premier pas vers la modélisation distribuée de tels problèmes couplés, il est nécessaire de développer des modèles robustes et efficaces du comportement des différentes composantes telles que sol insaturé, nappe, rivière, etc. (modèles intra-composantes). Ces modèles sont censés représenter l'hétérogénéité du milieu qui est le siège des écoulements. Enfin, il est nécessaire de développer des approches de couplage fort entre les différentes composantes (inter-composantes).

On verra que pour atteindre ce dernier objectif, on a privilégié une approche fortement couplée basée sur un modèle à une seule équation générique, permettant de décrire – et donc de coupler de façon naturelle, en espace et en temps – les différentes « composantes » des écoulements.

Les objectifs de cette thèse ont été concrétisés notamment par les réalisations suivantes :

- L'élaboration d'un nouveau modèle numérique 3D, basé sur des relations non linéaires effectives de saturation et de perméabilité (Richards modifié), pour la modélisation des écoulements à densité variable dans l'hypothèse d'une interface abrupte ;
- L'élaboration et l'implémentation d'un modèle verticalement intégré d'intrusion saline permettant d'étudier l'effet de l'hétérogénéité stochastique en 2D plan ; et l'analyse de la variabilité de l'interface eau douce / eau salée à travers des simulations de Monte Carlo et des calculs analytiques par perturbation et décomposition spectrale (Fourier-Wiener-Khinchine) ;
- Le couplage fortement « intégré » des écoulements plans de surface et souterrain, dans le cas d'une vallée fluviale avec nappe d'accompagnement. Ce modèle est appliqué à la vallée fluviale

de la Garonne (France) dans la région Toulouse-Moissac. Au-delà de cette application, le modèle plan est ensuite généralisé au cas où la nappe est sujette à l'intrusion saline.

### I - 3 PLAN DE LA THESE

La thèse est structurée de la façon suivante.

Le chapitre 2 présente à la fois une étude bibliographique et une introduction aux modèles équationnels développés dans les chapitres suivants. En premier lieu, on présente les équations des écoulements à densité variable - et à saturation variable - en milieu poreux hétérogènes en 3D et en 2D plan. Ensuite on présente différentes approches de couplage écoulement/transport à densité variable.

Une première approche de couplage densitaire (non utilisée dans ce travail) consisterait à coupler le transport advectif diffusif de sel avec l'équation d'écoulement, en tenant compte notamment de la diffusion du sel. Un second type d'approche (développée dans ce travail) suppose une interface abrupte entre eau douce et eau de mer, en négligeant la diffusion du sel. Cette dernière approche conduit à un modèle à deux fluides, avec hypothèse de non miscibilité des phases fluides eau douce / eau salée. Les différentes variantes de ces approches et les hypothèses qui en découlent sont présentées et critiquées. Finalement, on présente une classification des codes de calculs utilisés dans la modélisation des écoulements à densité variable.

Dans le chapitre 3, le problème de l'intrusion saline est abordé en 3D selon l'approche interface abrupte. Les équations d'écoulement sont formulées comme un problème d'écoulement diphasique non miscible 3D, dans lequel l'interface n'est pas tracée explicitement (ce qui évite les problèmes de remaillage inhérents aux approches de type 'traçage de surfaces'). Ainsi, dans le modèle « diphasique » proposé ici, l'interface est représentée implicitement dans les équations d'écoulement grâce à des relations effectives non linéaires de type saturation et perméabilité relative. Cette méthode, relativement novatrice, est apparentée aux travaux de Larabi et de Smedt (1997), Sbai (1999), et Aharmouch (2004), qui utilisent aussi des coefficients non linéaires pour représenter l'interface ; cependant, notre méthode diffère dans la formulation précise et rigoureuse du problème (condition dynamique à l'interface) et dans la détection et le traitement numérique d'un problème d'anti-diffusion localisé à l'interface, qui est inhérent au modèle équationnel pseudo-diphasique proposé. Cette méthode est ensuite testée en coupe verticale ( $x,z$ ) et comparée à des solutions analytiques du problème de Van der Ver et Glover (à interface abrupte) et, plus qualitativement, à une solution numérique du problème de Henry (1964) (qui tient compte de la diffusion de sel).

Le chapitre 4 porte sur l'étude de l'effet de l'hétérogénéité stochastique d'un aquifère côtier sur l'intrusion saline, et notamment, sur la distribution spatiale de l'interface eau douce / eau salée  $Z(x,y)$ . Le modèle - appelé « SWIM2D » - est une version spatialement distribuée du modèle classique d'interface abrupte de Ghyben-Herzberg, avec écoulement plan d'eau douce, et coin salé quasi-statique. L'étude stochastique de l'interface saline  $Z(x,y)$  est présentée sous la forme de deux publications. Dans la première publication, une représentation spectrale Fourier-Wiener-Khinchine est appliquée à l'EDP stochastique régissant l'écoulement plan d'eau douce - et l'intrusion saline quasi-statique. A partir de cette étude on obtient une solution analytique de l'incertitude de la position de l'interface, fonction de la structure et du degré de variabilité du réservoir poreux. Cette solution analytique est confrontée à des simulations numériques dans des milieux moyennement à fortement hétérogènes. Dans la deuxième publication, les aspects numériques liés à la modélisation des milieux fortement hétérogènes sont développés : notamment la méthode de continuation utilisée pour la modélisation des milieux fortement hétérogènes, et appliquée ici au problème de l'intrusion saline.

Dans le Chapitre 5, on s'est intéressé à un autre type de couplage, les interactions « surface/souterrain », en présence ou non de l'intrusion saline. Les équations d'écoulements plans ( $x,y$ ) pour les eaux de surface sont développées avec les différentes simplifications possibles. Ensuite une analogie est montrée entre les équations d'eau de surface et les équations de Boussinesq,

ainsi qu'avec les équations plus générales des milieux macroporeux à perte de charge quadratique (Ward-Forchheimer). Puis une procédure de couplage surface/souterrain est développée. Le modèle couplé est ensuite appliqué, en premier lieu, à des cas simplifiés (méandres rectangulaires, etc.). Enfin la méthode est appliquée à l'écoulement dans une partie de la vallée alluviale de la Garonne au niveau de Monbéqui, entre les villes de Toulouse et Moissac. Pour faire cette simulation, un modèle numérique intégrant le fond de la rivière et la topographie était indispensable. Ainsi une méthode pour l'obtention d'un modèle intégré numérique de terrain (MINT) à partir d'un nombre limité de sections de rivières est également élaborée et appliqué au site « Garonne ».

Dans le chapitre 6 les conclusions majeures, les résultats et les perspectives découlant de ce travail sont présentés.



## **Chapitre II MODELISATION DES ECOULEMENTS A DENSITE VARIABLE**

## **TABLE DES MATIERES DU CHAPITRE II**

<b>II – 1</b>	<b>Notions de base</b>	<b>13</b>
II - 1.1	Volume Elémentaire Représentatif (VER)	13
II - 1.2	Définitions	13
II - 1.3	Notion de charge hydraulique	14
<b>II - 2</b>	<b>Ecoulement en milieu poreux</b>	<b>15</b>
II - 2.1	Equation de conservation de masse	15
II - 2.2	Equation de conservation de la quantité de mouvement – Loi de Darcy	16
II - 2.3	Critiques et limitations de la loi de Darcy	17
II - 2.4	Ecoulements 3D variablement saturés à densité constante	17
II - 2.5	Ecoulements 3D saturés à densité constante	21
II - 2.6	Ecoulement 2D en nappes à densité constante- Dupuit	21
II - 2.7	Méthodes de résolution numérique	23
<b>II - 3</b>	<b>Modélisation des écoulements à densité variable</b>	<b>24</b>
II - 3.1	Densité et concentration	24
II - 3.2	Approches avec zone de mélange (diffusion)	24
II - 3.3	Approches avec interfaces abruptes (sans diffusion)	29
II - 3.4	Discussions sur les approches de modélisation	35
<b>II - 4</b>	<b>Classification des modèles hydrogéologiques</b>	<b>35</b>

## II - 1 NOTIONS DE BASE

Dans les paragraphes suivants les quelques notions de base qui interviennent dans la description des écoulements en milieux poreux seront présentées.

### II - 1.1 Volume Élémentaire Représentatif (VER)

Un volume élémentaire représentatif est un volume pour lequel les propriétés caractéristiques moyennes (comme la porosité, la perméabilité dans le cas d'un milieu poreux) peuvent être déduites. En réalité un milieu poreux est constitué de grains solides et vides pour lesquelles il n'est pas possible d'attribuer des notions comme la porosité et la perméabilité qu'à partir d'une échelle supérieure de plusieurs ordres de grandeur à l'échelle des pores. Le choix du VER doit donc répondre aux critères suivants (de Marsily 1994) :

- Le VER doit contenir un grand nombre de pores afin d'avoir une moyenne globale significative ;
- Le VER doit être suffisamment petit pour que les variations des propriétés d'un domaine au domaine voisin puissent être approchées par des fonctions continues pour pouvoir introduire l'analyse infinitésimale, sans introduire d'erreur décelable par les instruments de mesure à l'échelle macroscopique.

D'après les critères ci-dessus, un VER dépend non seulement de la structure du milieu poreux, mais aussi des phénomènes physiques étudiés. Un VER doit être assez grand pour représenter la structure du milieu poreux, mais aussi petit pour que les variations des propriétés, parfois non-linéaires (teneur en eau), soient continues. Une telle définition appliquée à l'hydrogéologie, est sûrement subjective car l'hétérogénéité existe à toutes les échelles d'un milieu poreux naturel, et plusieurs hypothèses de modélisation existent pour chaque problème.

### II - 1.2 Définitions

- Porosité  $\phi$  : rapport du volume des vides au volume total  $V_t$  du sol

$$\phi = \frac{V_{vide}}{V_t} \quad (2.1)$$

- Teneur en eau volumique  $\theta$  ( $m^3/m^3$ ) : rapport du volume de l'eau  $V_{eau}$  contenue dans les pores (ou vides) du sol, au volume total  $V_t$  du sol considéré :

$$0 < \theta = \frac{V_{eau}}{V_t} < 1 \quad (2.2)$$

- Saturation  $S$  : rapport du volume d'eau au volume des vides dans le sol :

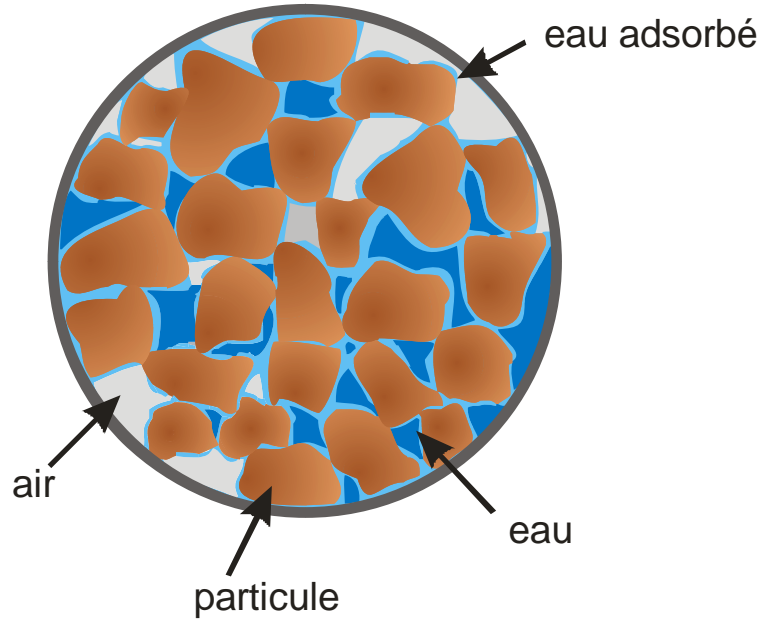
$$S = \theta / \phi \quad (2.3)$$

- La conductivité hydraulique et la perméabilité

La conductivité à saturation peut s'exprimer sous la forme d'un produit de deux facteurs, l'un dépendant des caractéristiques du fluide (l'eau), l'autre dépendant uniquement des caractéristiques de la phase solide et traduisant la facilité avec laquelle le sol se laisse traverser par les fluides, appelée perméabilité intrinsèque  $k$  ( $m^2$ ) :

$$K_s = \frac{\rho g}{\mu} k = \frac{g}{\nu} k \quad (2.4)$$

où  $\nu$  et  $\mu$  sont respectivement les viscosités cinématique ( $m^2/s$ ) et dynamique ( $kg/m/s$ ) de l'eau.



**Fig. 2.1** Représentation d'un milieu poreux

### II - 1.3 Notion de charge hydraulique

En hydrogéologie il est plus commun de remplacer la pression par la charge hydraulique équivalente. Bien que plus appropriée pour la modélisation de l'écoulement de l'eau dans des systèmes à densité constante, elle est appliquée aussi aux systèmes à densité variable et les systèmes multiphasiques.

La charge hydraulique totale  $H$  est donnée par la somme du potentiel de pression relatif à la pression de l'air  $h$  et du potentiel gravitaire

$$H = h + \mathbf{g}_B \bullet \mathbf{x} \quad (2.5)$$

où :

$\mathbf{g}_B = -\mathbf{g} / |\mathbf{g}|$ , «  $\mathbf{g}$  » étant le vecteur gravité ( $|\mathbf{g}| \approx 9.81 \text{ m.s}^{-2}$ ) ;

$\mathbf{x}$  est le vecteur des coordonnées du point (à l'échelle du VER) dans le repère (Ox, Oy, Oz) ;

$h$  est le potentiel de pression capillaire [L].

Le potentiel de pression «  $h$  » mesure la différence, exprimée en mètres d'eau, entre la pression de la phase liquide (l'eau) et celle de la phase gazeuse (l'air):

$$-\infty < h = \frac{P_{\text{eau}} - P_{\text{air}}}{\rho g} < +\infty \quad (2.6)$$

- En zone saturée, «  $h$  » représente la pression hydrostatique exercée en un point du sol par la colonne d'eau qui le surmonte. Comme le système est envahi d'eau, la pression de l'eau est plus forte que la pression de l'air ( $h > 0$ ).
- En zone non saturée, «  $h$  » représente l'intensité des forces de capillarité et d'adsorption qui attirent et lient la phase liquide à la phase solide ( $h < 0$ ). Dans le cas d'effets strictement capillaires, elle est directement reliée au rayon de courbure des ménisques (interfaces eau / air formés dans les capillaires du sol) par la loi de Jurin (2.7).

$$h = \frac{-2 \sigma \cos(\varphi)}{\rho g r} = \frac{-A}{r} \quad (2.7)$$

où

- $\sigma$  : Tension superficielle de l'eau, inversement proportionnelle à la température ( $\sigma \approx 0.0725 \text{ Nm}^{-2}$  à 20 C) ;
- $\varphi$  : Angle de contact entre l'interface eau / air et la paroi du capillaire, supposé nul dans les sols (en supposant une mouillabilité parfaite de la phase solide vis à vis de l'eau) ;
- $\rho$  : Masse volumique de l'eau (en négligeant celle de l'air) ;
- $r$  : Rayon du pore assimilé à un tube capillaire, égal au rayon du ménisque si  $\varphi = 0$ .

En résumé, en zone non saturée, l'eau est en sous pression par rapport à la pression atmosphérique ( $h < 0$ ). Une pression très fortement négative  $h \rightarrow -\infty$  (ou forte succion) signifie une prédominance des forces d'adsorption face aux forces de capillarité, les rayons de courbures des interfaces eau / air étant petits. Une pression faiblement négative (faible succion) ou proche de zéro (pression proche de la pression atmosphérique) signifie au contraire que les rayons des interfaces eau/air sont grands, et/ou que les pores sont presque saturés.

A l'échelle macroscopique (supérieure au VER), l'interface entre la zone saturée et la zone non saturée est définie, en terme de pression, par  $h = 0$ , c'est-à-dire,  $p = p_{\text{ATM}}$ .

L'iso-surface  $h(x,y,z,t) = 0$  représente, lorsqu'elle existe, une surface libre interne au milieu poreux (cas d'un domaine poreux « partiellement saturé »).

## II - 2 ECOULEMENT EN MILIEU POREUX

L'équation générale des écoulements en milieux poreux variablement saturés (présence de zones saturées et non saturées en eau) à densité variable, écrite dans un système de coordonnées cartésiennes ( $x, y, z$ ) à l'échelle macroscopique, est déduite du principe de conservation de masse et de la loi de Darcy.

### II - 2.1 Equation de conservation de masse

On considère un volume élémentaire de contrôle de milieux poreux centré dans des coordonnées cartésiennes. On considère l'axe  $z$  vertical et dirigé vers le haut. A un certain instant  $t$  la masse d'eau dans le volume de contrôle est donnée par :

$$Mass = \rho \theta \Delta x \Delta y \Delta z \quad (2.8)$$

avec  $\theta$  la teneur en eau effective du milieu poreux en volume d'eau par volume de milieu poreux [ $\text{L}^3/\text{L}^3$ ],  $\rho$  la densité de l'eau en [ $\text{M}^3/\text{L}$ ].

Le principe de conservation de masse postule ou implique que la variation de masse stockée dans le milieu poreux est égale à la différence du flux entrant moins le flux sortant et le terme source :

$$\frac{\partial Mass}{\partial t} = \text{flux entrant} - \text{flux sortant} + \text{terme source} \quad (2.9)$$

Le signe du terme source est considéré par convention. En général le terme source  $S$  est considéré comme positif pour un apport d'eau et négatif pour une extraction d'eau.

En développant le flux en série de Taylor jusqu'au premier ordre dans le second terme de l'équation (2.8) on obtient :

$$-\nabla \cdot (\rho q) \Delta x \Delta y \Delta z + \rho_s Q_s \Delta x \Delta y \Delta z \quad (2.10)$$

Pour dériver le terme de droite de l'équation (2.9), on considère la matrice solide comme rigide et immobile mais faiblement déformable dans la direction verticale,  $z$ . On considère aussi que la densité varie en fonction de la pression et de la concentration en soluté (Ackerer *et al.* 1999). On néglige la variation de la densité en fonction de la température. Ainsi on obtient :

$$\frac{\partial Mass}{\partial t} = \rho \left[ \theta \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\theta}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\theta}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\theta}{\Delta z} \frac{\partial \Delta z}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} \right] \Delta x \Delta y \Delta z \quad (2.11)$$

où  $p$  la pression de l'eau en  $[F/L^2]$  et  $C$  est la fraction massique du soluté.

On définit  $\alpha$  le coefficient de compressibilité élastique du milieu poreux en  $[L^2/F]$ , et  $\beta$  le coefficient de compressibilité élastique de l'eau  $[L^2/F]$  (Bear 1972).

$$\alpha = \frac{1}{\Delta z} \frac{\partial \Delta z}{\partial p} \quad \text{et} \quad \beta = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p} \quad (2.12) \text{ et } (2.13)$$

En remplaçant (2.12) et (2.13) dans (2.11) on obtient :

$$\frac{\partial Mass}{\partial t} = \rho \left[ \theta(\alpha + \beta) \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\theta}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial \theta}{\partial t} \right] \Delta x \Delta y \Delta z \quad (2.14)$$

Enfin en regroupant le terme de droite et de gauche, on obtient l'équation de conservation de masse :

$$\left[ \theta(\alpha + \beta) \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\theta}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial \theta}{\partial t} \right] = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\rho \mathbf{q}) + \frac{\rho_s}{\rho} Q_s \quad (2.15)$$

En introduisant la notion de charge hydraulique l'équation (2.15) devient :

$$\frac{\partial}{\partial t} [M(h, \mathbf{x}) + Cm + \theta(h, \mathbf{x})] = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\rho \mathbf{q}) + Q_s \quad (2.16)$$

où :

$M$

: est le terme de stockage élastique ( $m^3/m^3$ ) qui traduit la compressibilité de l'eau et de la matrice solide. Il peut être négligé dans les zones insaturées ( $M = 0$  si  $h < 0$ ), et proportionnel à la pression dans les zones saturées ( $M = S_s h$  si  $h > 0$ , où  $S_s$  est la storativité spécifique, en  $m^{-1}$ ). Dans la pratique de la modélisation hydrologique,  $M = 0$ , excepté dans un milieu totalement saturé (cas des nappes confinées). Il peut cependant ne pas être négligeable dans les milieux argileux ;

$$Cm = \frac{\theta}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial C} C$$

: est le terme qui exprime la variation de la densité en fonction de la fraction massique du soluté.  $C=0$  dans le cas où la modélisation ne fait pas intervenir un transport de soluté à forte concentration.

## II - 2.2 Equation de conservation de la quantité de mouvement – Loi de Darcy

La loi de comportement à l'échelle macroscopique des écoulements en milieux poreux est la loi de Darcy (1856). Cette loi initialement obtenue sur des expériences 1D dans des colonnes formées de sable, homogènes et isotrope, est généralisée aux écoulements saturés et non saturés (Buckingham 1907) en milieux hétérogènes et anisotropes. Elle exprime la densité de flux  $\mathbf{q}$  ( $m/s$  ou  $m^3/m^2/s$ ) à travers le milieu poreux, comme étant proportionnelle au gradient de charge hydraulique  $H$  (m). Cette densité  $\mathbf{q}$  est aussi appelée vitesse de filtration. Elle est reliée à la vitesse réelle  $\mathbf{u}$  des écoulements par  $\mathbf{q} = \theta \mathbf{u}$ , où  $\theta$  est la teneur en eau effective du milieu poreux.

La loi de Darcy généralisée non saturée s'écrit :

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}(h, \mathbf{x}) \nabla H \quad (2.17)$$

où :

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{xx} & & \\ & K_{yy} & \\ & & K_{zz} \end{bmatrix} :$$

est le tenseur des conductivités hydrauliques (m/s) dans le repère principal d'anisotropie (Ox,Oy,Oz) ;

$$H = h + \mathbf{g}_B \cdot \mathbf{x} :$$

est la charge hydraulique totale (m) ;

$$\theta :$$

est la teneur en eau volumique effective (m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>).

Les équations de Darcy peuvent être obtenues à partir des équations de Navier-Stokes à partir de plusieurs prises de moyennes et approximations (qui ne seront pas examinées en détail ici).

## II - 2.3 Critiques et limitations de la loi de Darcy

Pour que la loi de Darcy soit valide, il faut que l'écoulement soit laminaire, ce qui est généralement le cas dans les milieux poreux. La vérification de cette condition se fait à l'aide du nombre de Reynolds, Re. En mécanique des fluides, Re mesure l'importance des forces d'inertie par rapport aux forces de viscosité. Il est donné par :

$$Re = \frac{qD}{\nu} \quad (2.18)$$

avec q	la vitesse [L/T]
$\nu$	la viscosité cinématique ( $\mu/\rho$ )
D	la longueur représentatif de l'écoulement [L]

Pour les écoulements en milieux poreux, q est considéré comme la densité de flux, et D est égale au diamètre effectif des grains  $d_{10}$  (la taille du filtre à travers duquel 10% en masse des grains passe).

Afin que la loi de Darcy soit applicable il faut que  $Re \leq 1$ . Muskat (1937) montre plusieurs études selon lesquelles l'écoulement est transitoire entre des valeurs de Reynolds comprises entre 1 et 12. A titre indicatif pour un sable de diamètre moyen de 0.5 mm la vitesse d'écoulement limite pour l'eau à température ambiante est de 0.2 cm/s. Cette valeur peut être dépassée dans le cas d'écoulement en milieux fracturés ou karstiques. Dans ce cas une loi de perte de charge quadratique (Darcy-Forchheimer) est utilisé (voir Chapitre 5).

## II - 2.4 Écoulements 3D variablement saturés à densité constante

### II - 2.4.1 Equation de Richards

Dans le cas général d'écoulement variablement saturé, l'effet de déplacement de l'air est négligé à cause de la grande différence avec la viscosité dynamique de l'eau. Dans ces cas le problème d'écoulement à deux phases (air/liquide) variablement saturées est réduit à un problème d'écoulement monophasique où l'air est considéré en équilibre statique. De plus, on associe à cette approximation le fait que la phase air est connectée à l'atmosphère ( $p_{AIR} = p_{ATM}$ ). Dans certains cas particuliers en hydrogéologie cette approximation peut s'avérer fausse notamment dans le cas des sols stratifiés et des crues éclairées où l'air ne peut pas échapper et induit une augmentation de la pression au niveau du front (Touma *et al.* 1984). Cette approximation n'est pas valable aussi pour la modélisation des réservoirs pétroliers ou dans la modélisation de système industriels comme les piles à combustible où une approche multiphasique est exigée.

Les équations d'écoulement en 3D variablement saturé sont obtenues en insérant la loi de Darcy dans l'équation de conservation de la masse, on obtient l'équation générale des écoulements en milieux poreux variablement saturés, ou équation de Richards (1931) ((2.19) (2.20)).

$$\frac{\partial \theta(h, \mathbf{x})}{\partial t} = \nabla \cdot [\mathbf{K}(h, \mathbf{x}) \nabla (h + \mathbf{g}_B \cdot \mathbf{x})] + Q_s \quad (2.19)$$

ou encore :

$$\frac{\partial \theta(h, \mathbf{x})}{\partial t} = \nabla \cdot [\mathbf{K}(h, \mathbf{x}) \nabla h] - \nabla \cdot [\mathbf{K}(h, \mathbf{x}) \mathbf{g}_B] + Q_s \quad (2.20)$$

On remarque que le terme de stockage élastique 'M' est négligé en comparaison au stockage dû à la variation de la teneur en eau (Freeze *et* Cherry, 1979). Le terme M peut être considéré dans les zones saturées au cours d'une simulation d'un milieu poreux variablement saturé, surtout lorsque la zone saturée est sujette à de fortes variations de pression et dans les zones argileuses sujettes à des phénomènes de gonflement et de retrait. Le terme C de variation de la densité en fonction de la concentration est nul car on considère que la densité est constante.

L'éq. (2.20) aux Dérivées Partielles (EDP) est une forme conservative mixte en  $h/\theta$  de l'équation de Richards exprimée à l'origine en  $h$ . Elle est de type parabolique en milieu non saturé (et non linéaire) et elliptique en milieu saturé (si le terme de sportivité spécifique traduisant les effets de compressibilité est nul). Un terme M non nul préserve le caractère parabolique de l'équation, évitant ainsi certaines difficultés de convergence qui se présentent lorsque l'équation devient elliptique dans les zones saturées (Trégarot 2002). Elle est applicable à tout instant  $t$  et en tout point  $x$  à l'intérieur du domaine de calcul, la loi de Darcy étant utilisée pour traiter les frontières du domaine. La résolution de la forme mixte de l'équation de Richards (2.20) permet donc de simuler les écoulements variablement saturés ( $h$ ), en milieux hétérogènes ( $x$ ) et anisotropes.

## II - 2.4.2 Modèles caractéristiques du sol

On suppose que la teneur en eau volumique et la conductivité hydraulique à un instant  $t$  dépendent seulement de la pression à cet instant ' $t$ ', et non de la densité de flux ou du gradient hydraulique. Ainsi les phénomènes d'hystérèse <sup>1</sup> (voir figure 2.2) sont omis.

## II - 2.4.3 Modèles de $\theta(h)$

Ce modèle décrit la variation de la teneur en eau en fonction de la pression. Ce comportement du sol est différent en imbibition (invasion) ou drainage. Il existe plusieurs modèles empiriques pour décrire la fonction  $\theta(h)$ . Les plupart intègre les notions/paramètres suivantes :

- $\theta_s$  est la teneur en eau volumique à saturation. A la fin d'une imbibition le milieu poreux n'est pas complètement envahi par l'eau car les vides interstitiels ne sont pas tous connectés. Zammit (1999) montre que le rapport  $\theta_s / \phi$  est compris dans l'intervalle [0.8, 1].
- $\theta_d$  est la teneur en eau résiduelle. A la fin d'une phase de drainage une petite quantité d'eau reste liée aux particules à cause des forces d'absorption. Cette quantité d'eau est obtenue expérimentalement pour de faibles valeurs de  $h = -150\text{m}$  (théoriquement pour  $h \rightarrow -\infty$ ). Wösten (1995) propose une valeur arbitraire de 0.01.
- $\theta_e$  est la teneur en eau effective qui correspond à la part de l'eau qui circule réellement dans le milieu

$$\theta_e = \theta - \theta_d \quad (2.21)$$

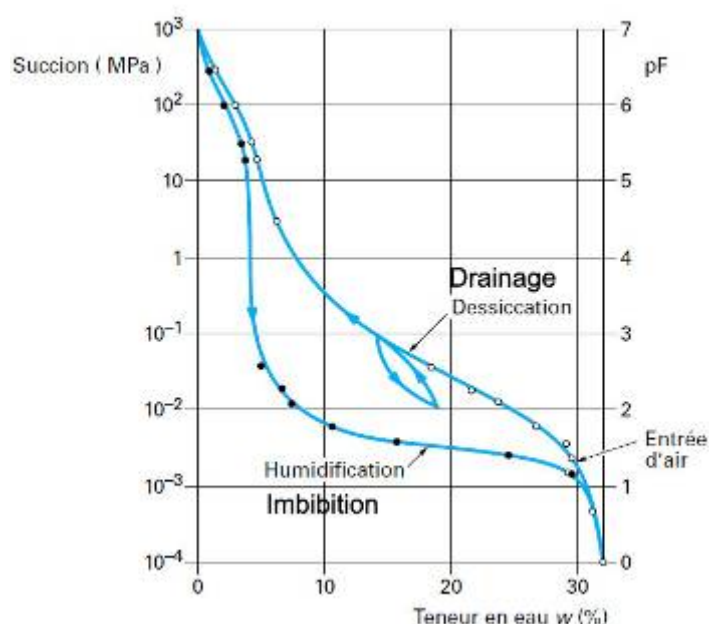
---

■ <sup>1</sup> Hystérèse. Dans la nature, un sol est soumis à des successions de phases de drainage et d'imbibition plus ou moins complètes, suivant des courbes  $\theta(h)$  non uniques, comprenant des courbes primaires et des courbes de passage imbibition/drainage. Ce phénomène d'hystérèse peut s'expliquer en partie par les variations de l'angle de contact  $\phi$  formé par les interfaces eau / air et eau / solide. Ainsi, à une pression  $h$  donnée,  $\theta$  est plus importante lors d'une phase de drainage du sol que lors d'une phase d'imbibition. Cependant, dans la pratique de la modélisation hydrologique à l'échelle d'un versant, ce phénomène d'hystérèse est négligé devant les effets des hétérogénéités, et une relation  $\theta(h)$  univoque est considérée pour définir localement les propriétés du sol.



- Se est la saturation effective du milieu poreux

$$S_e = \frac{S - S_d}{S_s - S_d} = \frac{\theta - \theta_d}{\theta_s - \theta_d} = \frac{\theta_e}{\theta_{es}} \quad (2.22)$$



**Fig.2.2** Courbes typiques de teneur en eau - succion pour un sable argileux (Croney 1952).

Le Tableau 2.1 présente une liste des modèles de  $\theta(h)$  les plus utilisés:

Tab. 2.1 Modèles de saturation effective (humidité)  $S_e(h)$ , d'après (Trégarot 2000).

Auteur(s)	Modèle $\theta(h)$	Remarques
Brooks et Corey (1964)	$\frac{\theta - \theta_d}{\theta_s - \theta_d} = \left( \frac{h_b}{h} \right)^{1/b}$ $\theta = \theta_s$	$h < h_b$ $h > h_b$ Modèle à 4 paramètres : $\theta_s, \theta_d, h_b, b$ .
Brutsaert (1966)	$\frac{\theta - \theta_d}{\theta_s - \theta_d} = \frac{1}{1 + (-\alpha h)^n}$	Modèle à 4 paramètres : $\theta_s, \theta_d, \alpha, n$ .
Campbell (1974)	$\frac{\theta}{\theta_s} = \left( \frac{h_b}{h} \right)^{1/b}$ $\theta = \theta_s$	$h < h_b$ $h > h_b$ Modèle à 3 paramètres : $\theta_s, h_b, b$ . Modèle de Brooks et Corey, privé du paramètre $\theta_d$ .
Van Genuchten (1980)	$\frac{\theta - \theta_d}{\theta_s - \theta_d} = \left[ \frac{1}{1 + (-\alpha h)^n} \right]^m$	Modèle à 5(ou 4) paramètres : $\theta_s, \theta_d, m, n, \alpha$ . $m = 1$ : modèle de Brutsaert ; $m = 1 - 2/n$ : modèle de Burdine ; $m = 1 - 1/n$ : modèle de Mualem.

Exponentiel	$\frac{\theta - \theta_d}{\theta_s - \theta_d} = e^{\alpha(h-h_b)}$ $\theta = \theta_s$	Modèle à 4 paramètres : $\theta_s, \theta_d, \alpha, b$ . Modèle apparenté au modèle K(h) exponentiel de Gardner et de Rijtema.
	$h < h_b$ $h > h_b$	

où :

- le paramètre  $h_b$  ou  $-1/\alpha$  (négatif) est un facteur d'échelle, lié à la pression d'entrée d'air au-dessus de laquelle le sol est pratiquement saturé ( $\theta \approx \theta_s$ ). Il représente aussi la hauteur de la frange capillaire se développant au-dessus des zones saturées en eau. Cette frange correspond à peu près à l'intervalle de pression présentant un palier significatif de teneur en eau.
- le paramètre  $b$  ou  $1/(m.n)$  (positif) est un facteur de forme adimensionnel indiquant la « rapidité » de la cinétique de transition entre l'état saturé et l'état sec en fonction d'une variation de pression.

Pour plus de détails sur l'interprétation de ces paramètres, voir Ababou (1991, Chap.4).

## II - 2.4.4 Modèles de K { $\theta(h)$ }

La conductivité hydraulique dépend de l'état de saturation du sol, et donc de la pression. Lorsque l'humidité du sol augmente, les forces capillaires deviennent plus faibles et les particules du milieu poreux résiste moins à l'écoulement. La conductivité hydraulique diminue lorsque le milieu se désature. Sa valeur maximale est obtenue à saturation  $K_s$ . La conductivité hydraulique en écoulement variablement saturé peut être définie comme le produit de la conductivité à saturation  $K_s$  et de la conductivité relative  $K_R$  par analogie avec le cas des écoulements diphasiques non miscibles :

$$K(\theta) = K_s K_R(\theta) \quad (2.23)$$

La conductivité relative  $K_R$  varie entre 0 et 1. Les courbes  $K_r(h)$  sont définies à partir des modèles  $K_r(S_e)$  ou  $K_r(q)$  en utilisant un des modèles empiriques de  $\theta(h)$ . Les modèles les plus connus de  $K_r(S_e)$  sont des fonctions puissances. Ils représentent le milieu poreux comme des tubes capillaires en parallèles. Parmi les modèles de  $K_r(h)$  on peut citer le modèle de Childs *et* Collis-George (1950) (voir éq. (2.24)), le modèle de Burdine (1953) (voir éq. (2.25)), et le modèle de Mualem (1976) (voir éq. (2.26)).

$$K_r(S_e) = S_e^{n_{CCG}} \left[ \int_0^{S_e} \frac{[S_e - S_e'] dS_e'}{h(S_e')^2} \right] \left[ \int_0^1 \frac{[1 - S_e'] dS_e'}{h(S_e')^2} \right]^{-1} \quad (2.24)$$

$$K_r(S_e) = S_e^{n_B + 1} \left[ \int_0^{S_e} \frac{dS_e'}{h(S_e')^2} \right] \left[ \int_0^1 \frac{dS_e'}{h(S_e')^2} \right]^{-1} \quad (2.25)$$

$$K_r(S_e) = S_e^{n_M} \left[ \int_0^{S_e} \frac{dS_e'}{h(S_e')} \right]^2 \left[ \int_0^1 \frac{dS_e'}{h(S_e')} \right]^{-2} \quad (2.26)$$

Le modèle  $K(S_e)$  de Mualem (1976) associé au modèle  $S_e(h)$  de Van Genuchten (1980) donne:

$$K_r(h) = \frac{[1 - (-\alpha h)^{n-1} [1 + (-\alpha h)^n]^{-m}]^2}{[1 + (-\alpha h)^n]^{m/2}} \quad (2.27)$$

avec la relation :  $m = 1 - 1/n$ .

Le même modèle de K(Se) (Mualem 1976) associé cette fois-ci au modèle Se(h) de Brooks *et* Corey (1964) donne:

$$K_r(h) = \left( \frac{h_b}{h} \right)^{2+2.5/b} \quad (2.28)$$

## II - 2.5 Écoulements 3D saturés à densité constante

Dans le cas de milieux poreux compressibles complètement saturés ( $h > 0$ ), l'équation d'écoulement est écrite en termes de la charge hydraulique ou potentiel total  $H = h + \mathbf{g}_B \cdot \mathbf{x}$ , somme du potentiel de pression et du potentiel gravitaire. Elle peut être déduite des équations précédentes et des écoulements variablement saturés, avec  $h > 0$  :

$$S_s(\mathbf{x}) \frac{\partial H}{\partial t} = \nabla \cdot [\mathbf{K}_s(\mathbf{x}) \nabla H] + Q_s \quad (2.29)$$

où :

$S_s$  : storativité spécifique ( $m^{-1}$ ) qui traduit la compressibilité de l'eau et de la matrice solide ;

$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{sxx} & & \\ & K_{syy} & \\ & & K_{szz} \end{bmatrix}$  : tenseur de conductivité hydraulique (m/s) à saturation ( $h > 0$ ) dans le repère principal d'anisotropie (Ox,Oy,Oz).

L'équation (2.29) est linéaire et parabolique (elliptique si le terme de storativité spécifique  $S_s = 0$ ).

## II - 2.6 Ecoulement 2D en nappes à densité constante- Dupuit

Dans le cas de modélisation à grande échelle ou de modélisation stochastique Monte carlo qui demande beaucoup de ressources, l'utilisation de l'approximation de Dupuit, lorsqu'elle est applicable est une bonne alternative. L'approximation de Dupuit revient à intégrer verticalement les équations d'écoulement (ou orthogonalement aux éponges de l'aquifère). L'hypothèse principale est que les écoulements sont considérés quasi-horizontaux. Ces hypothèses sont assez bien satisfaites loin des exutoires (sources, rivières, surfaces de suintement, etc.) ou des lignes de crête (plans de flux nul).

Elles se justifient, d'une part par le fait que les nappes étudiées ont une extension horizontale de la dizaine à la centaine de kilomètres, bien supérieure à leur extension verticale (de l'ordre de la dizaine à la centaine de mètres), et d'autre part par le fait que les aquifères sont une superposition de couches dont le pendage est faible, de l'ordre de 1‰ à quelques 1 %. Tout concourt donc pour laisser un rôle secondaire à la coordonnée verticale de l'espace et remplacer le problème 3D par un problème 2D.

L'équation des écoulements résultante est appelée équation de Boussinesq des écoulements plans. La résolution de cette équation 2D peut se faire sur de très larges systèmes et ne demande comme principales entrées que la distribution verticalement intégrée des conductivités et porosités efficaces (pour les nappes libres), obtenues généralement lors des essais de pompage dans les nappes.

### II - 2.6.1 Equations en écoulements 2D plans en nappes libres

Ces équations correspondent, sous forme verticalement intégrée, à des écoulements saturés de type Darcy, comportant une surface libre au-dessus de laquelle le milieu est supposé sec (sans écoulement interne). Les hypothèses de base sont : (i) écoulements quasi-plans (x,y), (ii) vidange et remplissage instantanés de la porosité efficace au cours des mouvements de la nappe.

La loi de comportement de Darcy exprime le débit spécifique  $Q_s$  (en  $m^3/s/m$ ), ou bien la densité de flux  $q$  (en  $m^3/s/m^2$ ), comme suit :

$$\mathbf{Q}_s = \eta \mathbf{q} = -\mathbf{K}_s \eta \nabla Z_s \quad (2.30)$$

L'équation de conservation de masse s'écrit :

$$\phi_e \frac{\partial Z_s}{\partial t} = -\text{div}[\mathbf{Q}_s] = -\text{div}[\eta \mathbf{q}] \quad (2.31)$$

avec :

$$\begin{aligned} \phi_e &= \theta_s - \theta_d && : \text{porosité efficace de l'aquifère pour une nappe libre (m}^3/\text{m}^3) ; \\ \eta &= Z_s - Z_{\text{inf}} && : \text{tirant d'eau, puissance ou épaisseur de la nappe (m), depuis le toit du} \\ &&& \text{substratum de cote } Z_{\text{inf}} \text{ jusqu'à la surface libre de cote } Z_s ; \\ \mathbf{K}_s &= \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\text{sx}} & \\ & \mathbf{K}_{\text{sy}} \end{bmatrix} && : \text{tenseur de conductivité hydraulique à saturation dans le repère} \\ &&& \text{principal d'anisotropie (m/s).} \end{aligned}$$

Nous en déduisons l'équation d'écoulement :

$$\phi_e \frac{\partial Z_s}{\partial t} = \text{div}[\mathbf{K}_s \eta \nabla Z_s] \quad (2.32)$$

Nous pouvons aussi reformuler cette équation en faisant apparaître le tirant d'eau  $\eta$  comme seule inconnue :

$$\phi_e \frac{\partial \eta}{\partial t} = \text{div}[\mathbf{K}_s \eta \nabla \eta] + \text{div}[\mathbf{K}_s \eta \nabla Z_{\text{inf}}] \quad (1) \quad (2.33)$$

où l'on a, dans le cas général d'une nappe phréatique dans un aquifère hétérogène et à substratum variable :

$$\eta = \eta(x,y,t) = Z_s(x,y,t) - Z_{\text{inf}}(x,y), \quad \mathbf{K}_s = \mathbf{K}_s(x,y), \quad \phi_e = \phi_e(x,y).$$

L'équation (1) est non linéaire, de type parabolique. Elle fait apparaître la composante gravitaire de l'écoulement sous la forme d'un terme d'advection (2<sup>ème</sup> terme de droite), s'ajoutant aux effets de diffusion hydraulique (1<sup>er</sup> terme de droite). Lorsque le plancher de la nappe est horizontal, l'écoulement est diffusif pur.

L'équation (1) suppose que la charge hydraulique totale  $H$  est constante sur une verticale et égale à la cote  $Z_s$  de la surface libre. On considère aussi et que la porosité  $\phi_e$  et la conductivité  $\mathbf{K}_s$  sont également constantes sur une verticale, ou faiblement variables autour d'une valeur moyenne. Cependant, nous pouvons aussi trouver (1) sous la forme :

$$\phi_e \frac{\partial \eta}{\partial t} = \text{div}[\mathbf{T} \nabla \eta] + \text{div}[\mathbf{T} \nabla Z_{\text{inf}}] \quad (2) \quad (2.34)$$

où  $\mathbf{T} = \mathbf{T}(x,y,t)$  est la transmissivité hydraulique ( $m^2/s$ ), souvent préférée à la conductivité hydraulique par les hydrogéologues, et définie par :

$$\mathbf{T} = \int_{Z_{\text{inf}}}^{Z_s} \mathbf{K}_s dz, \text{ avec cette fois, } \mathbf{K}_s = \mathbf{K}_s(x,y,z) \quad (2.35)$$

Lorsque les variations temporelles de la surface libre  $Z_s$  sont négligeables par rapport à la valeur moyenne de l'épaisseur  $\eta = Z_s - Z_{\text{inf}}$ , ou lorsque la répartition verticale de  $\mathbf{K}_s$  est telle qu'elle entraîne de faibles variations temporelles de  $\mathbf{T}$ , alors  $\mathbf{T} = \mathbf{T}(x,y)$  et l'équation (2) devient linéaire.

## II - 2.6.2 Equations en écoulements 2D plans en nappes captive

Une nappe captive est une couche aquifère entièrement saturée en eau, confinée entre 2 couches appelées éponges, imperméables (aquicludes) ou faiblement perméables (aquitards), et dans laquelle la charge hydraulique totale  $H$  de l'eau est supérieure à la cote du toit  $Z_{\text{sup}}$  de la nappe. De plus, la compressibilité de l'eau ( $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$ ) et du milieu poreux ( $\phi_e = \phi_e(\mathbf{x}, t)$ ), pores et grains solides compris ne sont cette fois pas négligés. Cependant, bien que le milieu poreux soit compressible, sa vitesse de déplacement est négligée par rapport à celle de l'eau. L'équation des écoulements en nappe captive s'écrit :

$$S \frac{\partial H}{\partial t} = \text{div}[\mathbf{K}_s (Z_{\text{sup}} - Z_{\text{inf}}) \nabla H] \quad (2.36)$$

avec :

- $S$  : coefficient d'emmagasinement de la nappe captive ( $\text{m}^3/\text{m}^3$ ), obtenu par intégration verticale du coefficient d'emmagasinement spécifique  $S_s$  ( $\text{m}^{-1}$ ) qui tient compte de la compressibilité de l'eau et du milieu poreux ;
- $H$  : charge hydraulique totale (m) moyenne sur l'épaisseur saturée  $Z_{\text{sup}} - Z_{\text{inf}}$  ;
- $\mathbf{K}_s = \begin{bmatrix} K_{sxx} & \\ & K_{syy} \end{bmatrix}$  : tenseur de conductivité hydraulique à saturation dans le repère principal d'anisotropie (m/s), situé dans le plan des éponges.

Dans le cas général d'une nappe confinée en aquifère hétérogène et à plancher et toit variables, nous avons :  $S = S(x, y)$ ,  $H = H(x, y, t)$ ,  $\mathbf{K}_s = \mathbf{K}_s(x, y)$ ,  $Z_{\text{sup}} = Z_{\text{sup}}(x, y)$ ,  $Z_{\text{inf}} = Z_{\text{inf}}(x, y)$ .

L'équation (3) est de type parabolique, linéaire en raison de la transmissivité constante

$$T(x, y) = K_s [Z_{\text{sup}} - Z_{\text{inf}}] \quad (2.37)$$

## II - 2.7 Méthodes de résolution numérique

L'application des méthodes numériques permet de remplacer une équation aux dérivées partielles ou un ensemble d'équations aux dérivées partielles, par un système d'équations algébriques ou un ensemble de systèmes d'équations algébriques. La résolution de l'équation originelle se résume alors à la résolution du système d'équations obtenues par application de ces méthodes. Pour ce faire, plusieurs méthodes efficaces existent, et diffèrent principalement par la manière avec laquelle sont obtenus les systèmes d'équations algébriques équivalentes et parfois aussi de l'approche du problème.

Les méthodes numériques sont principalement basées sur les différences finies ou les éléments finis. Une introduction à la modélisation numérique en hydrogéologie est disponible dans bon nombre de livres de base tels que ceux de Bear et Verruijt (1987), Kinzelbach (1986), Wang et Andersson (1982), et dans d'autres travaux spécialisés tels que ceux de Celia et Gray (1992), Istock (1989), Gray (1984), Lewis et Roberts (1984), Narasimhan (1984) et Huyakorn et Pinder (1983). D'autres méthodes numériques sont aussi utilisées telles que les différences finies intégrées (volumes finis) ou la méthode de l'équation de l'intégrale de la frontière (boundary integral equation method) (Liggett *et* Liu, 1983).

## II - 3 MODELISATION DES ECOULEMENTS A DENSITE VARIABLE

### II - 3.1 Densité et concentration

La densité intervient comme variable dans les équations d'écoulement en milieux poreux. Or la densité dépend aussi de plusieurs autres variables comme la température (T), la pression (p), et la concentration (Ci) des différents constituants du fluide.

$$\rho = f(C_i, p, T) \quad (2.38)$$

Cette interdépendance lorsqu'elle ne peut pas être négligée, nous mène à considérer le couplage à densité variable. Ces problèmes appliqués aux milieux poreux sont rencontrés dans différents systèmes naturels et industriels en hydrogéologie (ou hydrologie souterraine), en géophysique, en génie de réservoir, en génie nucléaire, et en génie de matière. Les applications varient du transport des polluants denses, à l'intrusion saline en aquifères côtiers, à l'infiltration de lixiviat dans les décharges et le stockage des déchets industriels, à la conception des systèmes de chauffage géothermique, à la convection dans les couches de neige, et tant d'autres (Dierch et Kolditz, 2002). La même analyse peut être faite sur la viscosité cinématique qui varie en fonction de la concentration, mais son effet est négligeable dans les problèmes qui nous intéressent (II - 3.2.2).

L'un des problèmes majeur en hydrogéologie sujet à l'écoulement à densité variable est l'intrusion saline. En fait l'intrusion de l'eau de mer dans les aquifères d'eau douce est un phénomène naturel qui se produit dans les zones côtières. Dans une configuration classique d'intrusion saline l'eau douce glisse sur l'eau salée plus lourde dont la densité est supérieure à 1022 kg/m<sup>3</sup>. L'eau salée forme ainsi un biseau dans l'aquifère d'eau douce. A ce phénomène vient s'ajouter l'effet du pompage dans les aquifères côtiers. Dans cette configuration une zone salée de forme conique ce forme au niveau du puits (Diersch *et al.* 1984, Diersch *et* Nillert 1990, Reilly *et* Goodman 1987 et Holzbecher 1995).

Deux familles de modèles dont chacune intègre plusieurs variantes sont utilisées pour la modélisation des écoulements à densité variable appliquée à l'intrusion saline :

La première repose sur les équations couplées du transport et d'écoulement des fluides miscibles. Parmi les travaux de recherche qui ont utilisé cette méthode on peut citer : Segol *et al.* 1975, Huyakorn *et al.* 1987, Frind 1982, Voss (1984,1999), Voss *et* Souza (1987), Putti *et* Paniconi (1995), Diersch (1988), Kolditz *et al.* (1998). Cette méthode a vu un fort développement avec l'augmentation de la performance et de la capacité des calculateurs depuis une 20 année. Diersch *et* Kolditz (2002) présentent un état de l'art de cette méthode.

La seconde considère deux fluides non-miscibles avec une interface abrupte les séparant. Plusieurs formulations existent pour cette approche. Certaines sont basées sur les modèles de suivis d'interface. D'autres ressemblent aux écoulements multiphasiques en milieux poreux. Dans le cas où la zone salée est quasi statique, l'hypothèse de Badon-Ghyben (1888) et de Herzberg (1901) est appliquée. Nous utiliserons cette approche pour développer notre modèle 3D d'intrusion saline. Les deux approches seront présentées dans les deux sections suivantes.

### II - 3.2 Approches avec zone de mélange (diffusion)

#### II - 3.2.1 Equation de transport en milieux poreux

Les modèles mathématiques du transport de sels dans les milieux poreux sont basés sur les travaux de Henry (1959) et Bear (1972, 1979). L'approche consiste à coupler l'équation d'écoulement et de transport à l'aide d'une équation d'état qui relie la densité du soluté à la concentration du soluté dans la solution.

L'équation de transport décrit trois mécanismes de transport : la convection la diffusion et la dispersion (voir figure 2.3) :

- **l'advection** est le mécanisme de déplacement du soluté par le fluide :
- **la diffusion** exprime le flux du soluté d'une région de forte concentration à une région de faible concentration due au mouvement Brownien des ions et molécules. En condition permanente et en cas de faible gradient de concentration, ce phénomène est décrit par la loi linéaire de Fick :
- **la dispersion** est le mécanisme de diffusion du panache de concentration, dans la direction et à travers l'écoulement due à l'hétérogénéité présente à toutes les échelles. La dispersion conduit à une uniformisation du front de concentration.

L'équation de conservation de masse de soluté est donnée par:

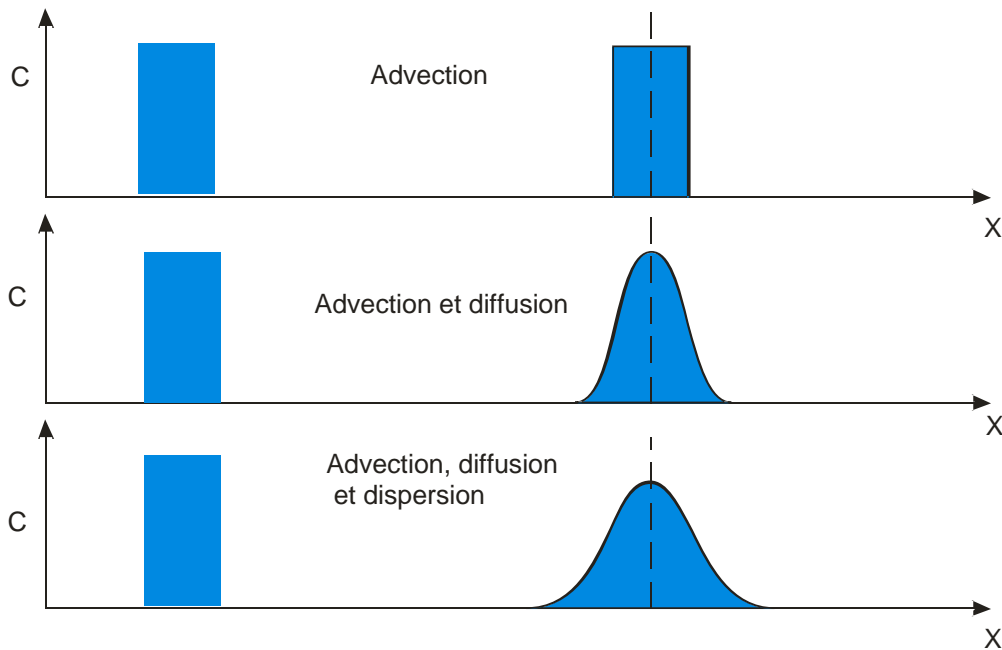
$$\frac{\partial(\theta\rho C)}{\partial t} = -\nabla j_{adv} - \nabla j_{diff} + \rho Q_s C_s \quad (2.39)$$

où  $j_{adv}$  est le flux advectif ;  
 $j_{diff}$  est le flux diffusif résultant de la diffusion moléculaire et la dispersion ;  
 $C_s$  est la concentration des termes sources ;  
 $Q_s$  est le flux des termes sources.

L'introduction des lois phénoménologiques dans l'équation de conservation de masse de soluté donne l'équation suivante :

$$\frac{\partial(\theta\rho C)}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho\phi\mathbf{V}C + \nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{D}\nabla C) + \rho Q_s C_s \quad (2.40)$$

où  $\mathbf{V}$  est le vecteur de vitesse effective en [L/T] et  $\mathbf{D}$  le tenseur de dispersion



**Fig. 2.3.** Représentation 1D des différents processus intervenant en transport.

En développant cette équation on obtient :

$$\theta\rho \frac{\partial C}{\partial t} + C \frac{\partial(\theta\rho)}{\partial t} = -\theta\nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{V}) - \rho\phi\mathbf{V} \cdot \nabla C + \nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{D} \cdot \nabla C) + \rho Q_s C_s \quad (2.41)$$

On multiplie l'équation de conservation de masse de l'écoulement par  $C$  :

$$C \frac{\partial(\rho\theta)}{\partial t} = -C\nabla \cdot (\rho q) + C\rho_s Q_s \quad (2.42)$$

Enfin on soustrait l'équation (2.42) de l'équation (2.41) :

$$\theta\rho \frac{\partial C}{\partial t} = -\rho\phi\mathbf{V} \cdot \nabla C + \nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{D} \cdot \nabla C) + \rho Q(C_s - C) \quad (2.43)$$

Les coefficients de dispersion du tenseur de diffusion sont obtenus par une des méthodes suivantes :

- **Model géométrique (Taylor et Aris) :**

Dans ce modèle, les coefficients sont obtenus pour une configuration simple, déterministe. Par exemple, dans un milieu constitué de cylindres, le coefficient de dispersion  $D_{ii}$  est donné par :

- écoulement parallèle aux cylindres :

$$\frac{D_{xx}}{D_m} = 0.002 Pe^2 \quad (2.44)$$

- écoulement perpendiculaire aux cylindres :

$$\frac{D_{xx}}{D_m} = 0.07 Pe^{1.7} \quad (2.45)$$

où  $Pe$  est le nombre adimensionnel de Peclet qui exprime le rapport entre la convection forcée (advection) et la diffusion moléculaire. Le nombre de Peclet est donné par :

$$Pe = \frac{V L}{D_m} \quad (2.46)$$

où  $V$  est la vitesse moyenne d'écoulement [ $L/T$ ] et  $L$  une longueur caractéristique [ $L$ ]

- **Méthode stochastique de changement d'échelle (ou Method of Volume Averaging) :**

Dans les méthodes de changement d'échelle, les propriétés macroscopiques sont calculées pour plusieurs configurations d'hétérogénéité à partir de changement d'échelle (Dagan 1982, Gelhar et Axness 1983). Les résultats obtenus prennent la forme du modèle de puissance :

$$\frac{D_{xx}}{D_m} = a Pe^b \quad (2.47)$$

tel que  $1 < b < 2$ . Pour des cylindres aléatoirement organisés en couches :  $a=0.7$  et  $b=1.2$

- **Modèle statistique (Bear 1961, Scheidegger 1961) :**

Le tenseur de dispersion est donné par :

$$\mathbf{D} = D_m \mathbf{I} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{\mathbf{V}\mathbf{V}}{|\mathbf{V}|} + \alpha_T |\mathbf{V}| \mathbf{I} \quad (2.48)$$

avec  $D_m$  la diffusion moléculaire effective après prise en compte de la tortuosité en [ $L^2/T$ ],  $\mathbf{I}$  le tenseur unité et  $\alpha_L$  et  $\alpha_T$  les coefficients de dispersivité intrinsèque, longitudinale et transversale en [ $L$ ]. Le coefficient  $\alpha_L$  est défini dans la direction principale de l'écoulement. Il varie de plusieurs ordre suivant le degré d'hétérogénéité du domaine et la longueur de l'écoulement (Gelhar 1982). Le coefficient  $\alpha_T$  est défini suivant la direction transversale à la direction principale de l'écoulement, Il est plus petit. En pratique on prend  $\alpha_T = 0.1$  à  $0.01 \alpha_L$ .

Les composantes du tenseur de diffusion regroupant la diffusion moléculaire et la dispersion obtenues par la méthode statistique sont données par (Bear 1979):



$$\begin{aligned}
D_{xx} &= \alpha_L \frac{1}{\theta} \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{1}{\theta} \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_T \frac{1}{\theta} \frac{v_z^2}{|v|} + D_m \tau_{xx} \\
D_{yy} &= \alpha_L \frac{1}{\theta} \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_T \frac{1}{\theta} \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{1}{\theta} \frac{v_z^2}{|v|} + D_m \tau_{yy} \\
D_{zz} &= \alpha_L \frac{1}{\theta} \frac{v_z^2}{|v|} + \alpha_T \frac{1}{\theta} \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{1}{\theta} \frac{v_y^2}{|v|} + D_m \tau_{zz} \\
D_{xy} &= D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{1}{\theta} \frac{v_x v_y}{|v|} \\
D_{xz} &= D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{1}{\theta} \frac{v_x v_z}{|v|} \\
D_{yz} &= D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{1}{\theta} \frac{v_y v_z}{|v|}
\end{aligned} \tag{2.49}$$

$D_m$  représente la diffusion moléculaire et  $(\tau_{xx}, \tau_{yy}, \tau_{zz})$  sont les composantes principales du tenseur de tortuosité. Ce modèle a été largement étudié dans les travaux de Lever et Jackson (1985), Hassanizadeh (1986), Kolditz et al. (1997) parmi d'autre.

### II - 3.2.2 Couplage de l'équation d'écoulement et de transport

Le couplage se fait à l'aide d'une équation d'état qui relie la densité à la concentration et une équation constitutive qui relie la viscosité à la concentration.

#### ◆ Equation d'état

Les équations d'état sont les relations entre les variables d'état d'un système à l'équilibre thermodynamique. La densité est exprimée en fonction de la concentration (à température constante). Henry (1964), Frind (1982), Huyakorn et al. (1987) et Voss et Souza (1987) donnent la densité  $\rho$  en fonction linéaire d'une densité de référence  $\rho_0$  et de la concentration  $C$  :

$$\rho = \rho_0 (1 + \varepsilon c) \tag{2.50}$$

où :

$\rho_0$  est la densité de l'eau douce [ $M/L^3$ ];

$\varepsilon = \frac{\rho_s - \rho_0}{\rho_0}$  est le contraste de densité [-];

$\rho_s$  est la densité à concentration maximale [ $M/L^3$ ];

$c = \frac{C}{C_{\max}}$  est la concentration normalisée [-].

Kolditz et al. (1996) proposent d'utiliser une loi exponentielle qui permet d'obtenir  $\frac{\partial \rho}{\partial C} = \beta_c \rho$  :

$$\rho(C) = \rho_0 e^{\beta_c (C - C_0)} \tag{2.51}$$

où  $\beta_c$  est un paramètre qui reste à déterminer.

Vogel (1995) propose d'utiliser une relation "parfaite", analogue à l'équation des gaz parfaits :

$$\frac{C_{\max}}{\rho(c)} = \frac{C_{\max} - C}{\rho_0} + \frac{C}{\rho_{\max}} \tag{2.52}$$

En prenant en compte l'équation d'état linéaire  $\rho(C)$  de l'équation (2.50) et en l'insérant dans l'équation d'écoulement (2.16), on obtient :

$$\left[ \theta S_p \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\theta}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial \theta}{\partial t} \right] = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\rho q) + \frac{\rho_s}{\rho} Q_s \quad (2.53)$$

avec :  $S_p = S_s / \rho_f g$  .

En introduisant maintenant la loi de Darcy, on obtient :

$$\left[ \theta S_p \frac{\partial p}{\partial t} + \theta \frac{\rho_0}{\rho} \frac{\varepsilon}{C_{\max}} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial \theta}{\partial t} \right] = \frac{1}{\rho} \nabla [\rho K (\nabla p - \rho g)] + \frac{\rho_s}{\rho} Q_s \quad (2.54)$$

En considérant la charge hydraulique de l'eau douce comme variable d'état, on obtient enfin :

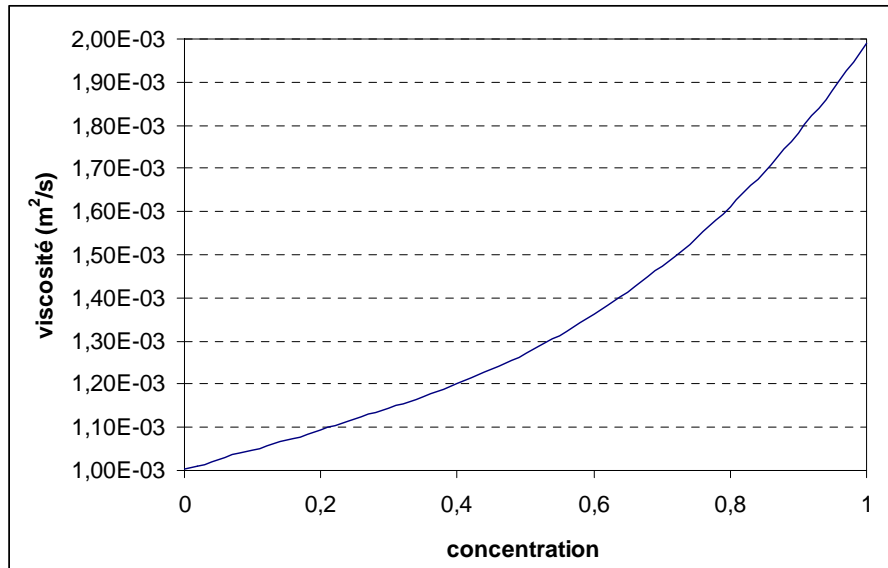
$$\left[ \theta S_s \frac{\partial h_f}{\partial t} + \theta \frac{\rho_0}{\rho} \frac{\varepsilon}{C_{\max}} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial \theta(h_f)}{\partial t} \right] = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \left[ \rho^2 K \left( \nabla h_f + \frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \nabla z \right) \right] + \frac{\rho_s}{\rho} Q_s \quad (2.55)$$

#### ♦ Effet rétroactif de la viscosité

La viscosité cinématique varie en fonction de la concentration en sel et de la température. Dans notre cas, on considère la viscosité à température ambiante. Les modèles qui donnent la variation de la viscosité en fonction de la concentration « c » sont de nature empiriques. Herbert et al. (1988) proposent le modèle suivant :

$$\mu = 1.002 \times 10^{-3} (1 + 0.4819 c - 0.2774 c^2 + 0.7814 c^3) \quad (2.56)$$

La figure (2.4) montre l'évolution de la viscosité cinématique en fonction de la concentration à température ambiante. Cette variation est faible pour des faibles valeurs de concentration. Ainsi elle est négligée dans la plus part des situations.



**Fig.2.4** Variation de la viscosité cinématique (m²/s) de l'eau en fonction de la concentration en sels à température ambiante.

### II - 3.2.3 Conditions limites

Les trois conditions limites classiques appliquées sont les suivantes.

- Condition de Dirichlet : spécification d'une concentration à la frontière  $c = f(\mathbf{x}, t)$  ; cette condition est appliquée par exemple à la frontière avec la mer, pour un problème d'intrusion saline.
- Condition de Neumann : spécification du flux normal de soluté à la frontière :  $\rho \mathbf{D} \nabla c \cdot \mathbf{n} = f(\mathbf{x}, t)$ .
- Condition de Cauchy : cette condition est équivalente à spécifier un flux de soluté « limité » par une condition de concentration :  $(\rho \mathbf{D} \nabla c - \rho \mathbf{q} c) \cdot \mathbf{n} = f(\mathbf{x}, t)$ .

## II - 3.2.4 Méthode de résolution numérique

La résolution numérique du système d'équations de transport et d'écoulement couplés est un vrai challenge numérique, à cause de la non-linéarité des deux équations et de leur interdépendance.

Dans l'équation de transport, la difficulté majeure est le calcul du terme de dispersion. Afin de faciliter le calcul, Essink (2001) traite séparément l'opérateur d'advection et celui de dispersion, avec des méthodes numériques adaptées à chacun. Il utilise pour l'opérateur d'advection une méthode lagrangienne (méthode des caractéristiques) tandis qu'il utilise pour l'opérateur de diffusion une méthode eulérienne (différences finies). L'utilisation des méthodes des caractéristiques permet de diminuer les oscillations numériques et la dispersion numérique.

Paniconi et Putti (1995) montrent que l'importance du couplage et le degré de non-linéarité dans l'équation du transport décroît dans le même sens que le contraste de densité ou lorsque la dispersion devient dominante.

Dans les cas de forts contrastes de densités (> 20%), rencontrés dans les problèmes de lessivage de dôme de sels, Herbert et al. (1988) proposent une technique de paramétrisation graduelle (Parameter stepping) et une interpolation mixte pour le calcul des vitesses. La technique de paramétrisation graduelle est analogue à la méthode proposée pour la simulation de milieu fortement hétérogène que nous proposons dans le Chapitre 4.

Dans l'équation d'écoulement, pour accélérer le calcul numérique, plusieurs approximations sont utilisées pour la résolution du système d'équations d'écoulement et de transport. La première consiste à considérer que la variation spatiale de la densité est plus faible par rapport à la variation temporelle (Bear 1972), ce qui donne l'approximation :

$$\nabla(\rho q) \approx \rho \nabla q$$

La deuxième est l'approximation de Oberbeck–Boussinesq, qui consiste à négliger la variation de la densité dans l'équilibre de masse ; avec cette approximation, seul le flux de Darcy dépend de la variation de densité.

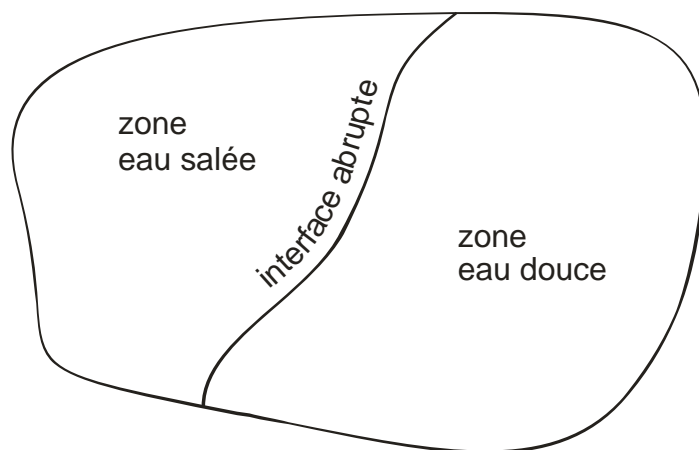
Younes (2003) fait une étude comparative de ces deux approximations et de la solution complète en utilisant des problèmes tests classiques. Il conclut que la première approximation donne le meilleur compromis entre exactitude de la solution et temps de calcul (40% de moins que la solution complète).

## II - 3.3 Approches avec interfaces abruptes (sans diffusion)

### II - 3.3.1 Introduction

Dans l'approche « interface abrupte », on considère l'eau salée et l'eau douce comme deux fluides non-miscibles séparés par une interface : voir figure (2.5).

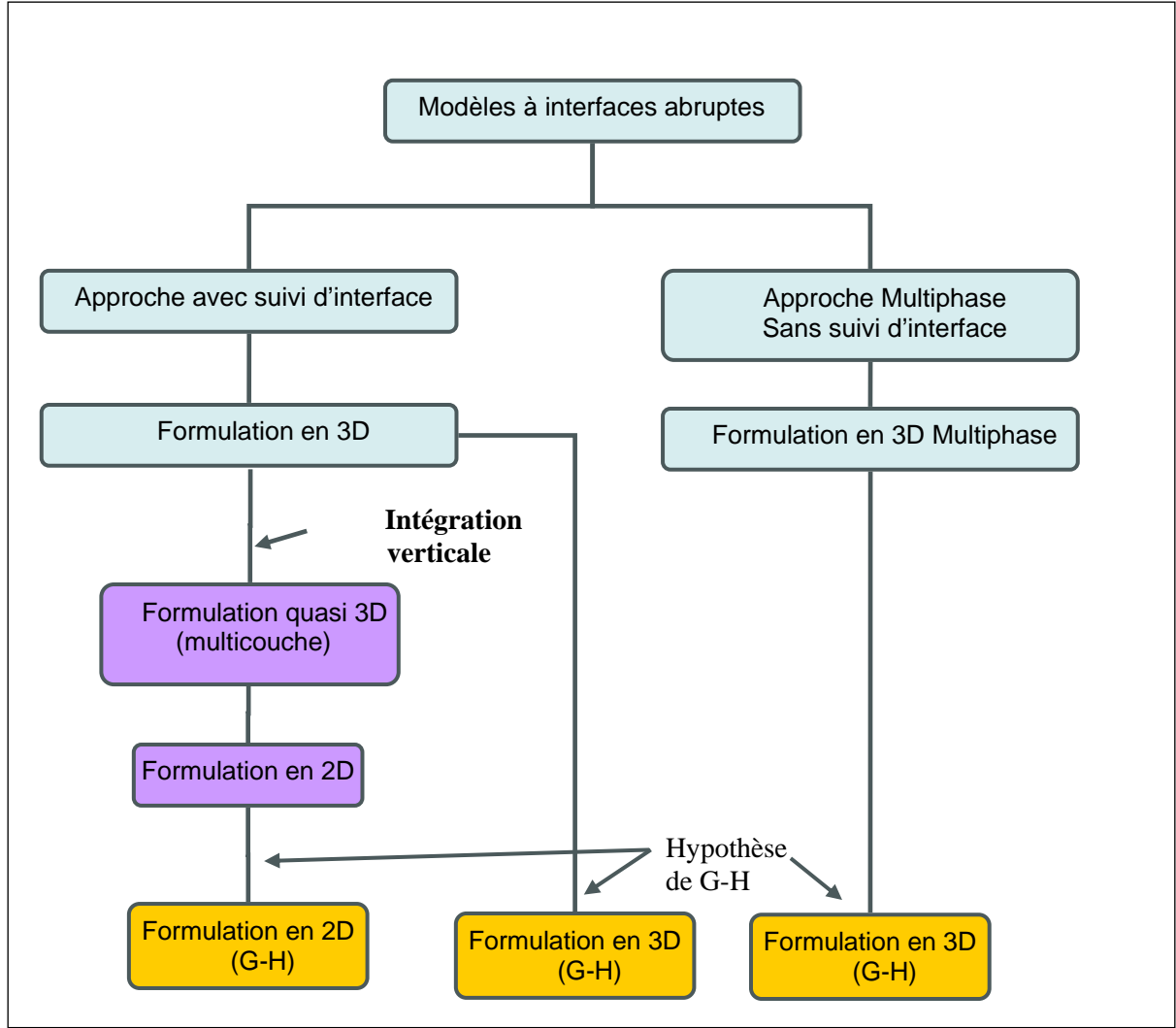
L'interface eau salée / eau douce est une surface imperméable en équilibre de pression. Autrement dit, la pression est continue de part et d'autre de l'interface. Par contre, la densité du fluide est discontinue de part et d'autre de l'interface. Il s'agit donc d'un modèle à deux fluides non miscibles, sans diffusion de sel.



**Fig. 2.5** Représentation du domaine dans l'hypothèse d'une interface abrupte.

Deux méthodes sont possibles pour la résolution de l'intrusion saline avec une approche de type **interface abrupte** (voir figure 2.6).

- La première est une méthode de suivi d'interface (surface tracking) qui consiste à diviser le domaine en deux régions distinctes dont chacune est associée à une équation d'écoulement. Ensuite, la solution des deux équations est utilisée pour retrouver la position de la surface qui représente l'interface eau douce / eau salée (Bear, 1999). La méthode de suivi d'interface peut être appliquée aussi dans le cas 2D ou quasi 3D.
- La deuxième méthode, dite 'multi-phasique', consiste à considérer l'eau salée et l'eau douce comme deux fluides non-miscibles séparés par une interface, l'écoulement de chaque phase fluide étant cependant résolu dans l'ensemble du domaine, de telle façon que la position de l'interface est obtenue implicitement à la fin de la résolution du problème. Au niveau de l'interface il n'y a pas de mélange (pas d'échange de masse) entre les deux phases fluides. Théoriquement aucune diffusion n'est permise au niveau de l'interface abrupte.



**Fig. 2.6** Les différentes variantes et approximations des modèles à interface abrupte pour la modélisation des écoulements à densité variable.

### II - 3.3.2 Approche avec suivi d'interface 3D

Cette approche appartient plus généralement à la famille des approches de suivi d'interface en mécanique des fluides. Elle est présentée par exemple dans Bear *et al.* (1999) pour le cas de l'intrusion saline en milieu poreux (aquifère côtier).

#### ♦ Equations d'écoulement dans l'eau douce et l'eau salée

On considère un écoulement en milieu poreux saturé, tant pour le fluide « eau douce » que pour le fluide « eau salée ». Dans chaque fluide, on utilise la loi de Darcy classique pour obtenir les équations d'écoulement (écoulement monophasique dans chaque zone).

- L'équation d'écoulement dans la zone d'eau douce est donnée par :

$$S_s^f(\mathbf{x}) \frac{\partial H^f}{\partial t} = \nabla \cdot [\mathbf{K}_s^f(\mathbf{x}) \nabla H^f] + Q_s^f \quad (2.57)$$

- L'équation d'écoulement dans la zone d'eau salée est donnée par :

$$S_s^s(\mathbf{x}) \frac{\partial H^s}{\partial t} = \nabla \cdot [\mathbf{K}_s^s(\mathbf{x}) \nabla H^s] + Q_s^s \quad (2.58)$$

### ♦ Equation de l'interface séparant les deux fluides

Les deux fluides sont séparés par une interface abrupte représentée par une surface. Cette surface de séparation est définie par l'équation :

$$F(x, y, z, t) = 0$$

ainsi que par sa vitesse  $\mathbf{u}$  et par le vecteur normal  $\mathbf{n}$  tel que :

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla F}{|\nabla F|}, \quad \mathbf{u} \cdot \nabla F = -\frac{\partial F}{\partial t}$$

On désigne par  $\tau$  la position de l'interface. A tout instant, la continuité de la pression de part et d'autre de l'interface donne :

$$\tau(x, y, t) = H^s(1 + \varepsilon) - H^f \varepsilon \quad (2.59)$$

où  $\varepsilon = \frac{\rho^f}{\rho^s - \rho^f}$  représente le contraste de densité entre l'eau douce et l'eau salée.

La condition de flux nul à travers l'interface pour la région d'eau douce est donnée par :

$$\left( \frac{\mathbf{q}^f}{\phi} - \mathbf{u} \right) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (2.60)$$

En insérant les différentes expressions dans l'équation précédente, on obtient :

$$\phi \varepsilon \frac{\partial H^f}{\partial t} - \phi(1 + \varepsilon) \frac{\partial H^s}{\partial t} = [\mathbf{K}_s^f(\mathbf{x}) \nabla H^f] \cdot [\nabla z - (1 + \varepsilon) \nabla H^s + \varepsilon \nabla H^f] \quad (2.61)$$

En appliquant le même calcul pour la zone d'eau salée, on obtient de même :

$$\phi \varepsilon \frac{\partial H^f}{\partial t} - \phi(1 + \varepsilon) \frac{\partial H^s}{\partial t} = [\mathbf{K}_s^s(\mathbf{x}) \nabla H^s] \cdot [\nabla z - (1 + \varepsilon) \nabla H^s + \varepsilon \nabla H^f] \quad (2.62)$$

### II - 3.3.3 Approche multicouche 'quasi 3D'

Dans ce type d'approche, l'aquifère est représenté par un système multicouche, constitué de couches perméables parallèles (sub-horizontales) séparées par des couches semi-perméables ou confinantes.

L'écoulement est intégré verticalement dans chaque couche perméable, tout en considérant un terme d'échange vertical entre les couches. Ce terme d'échange provient de l'intégration de l'équation d'écoulement 3D. De plus, l'écoulement dans chaque couche est représenté par deux équations : une pour l'eau douce et une autre pour l'eau salée. La position de l'interface est déduite de la solution des équations couplées d'écoulements. Une méthode de suivi d'interface est nécessaire pour déterminer la position exacte de l'interface.

L'échange vertical entre les couches est implémenté d'une façon empirique et il ne prend pas en compte la différence de densité entre les couches. Un terme source vertical d'une zone salée se déverse dans une zone d'eau douce sans prise en compte de la différence de densité.

Ce type de modèle a été proposé par Essaid (1990a), et il est implémenté par exemple dans le code numérique SHARP (Essaid, 1990b). Le modèle 2D appliqué dans chaque couche est celui décrit dans le chapitre IV avec des termes sources qui expriment les échanges entre les couches.

### II - 3.3.4 Approche diphasique 3D

Dans cette section, on présente les équations d'écoulements diphasiques qui régissent l'écoulement de deux fluides non-miscibles et actifs (en mouvement) dans un milieu poreux. Selon le contexte, on considèrera soit le cas général de deux fluides (mouillant et non-mouillant), soit le cas plus particulier de l'intrusion saline à deux fluides de densités différentes (qui nous intéresse plus spécialement ici).

#### ♦ Equations de conservation de masse et de conservation de QDM

L'équation de conservation de masse s'écrit, pour chaque phase :

$$\frac{\partial \Theta_\alpha}{\partial t} + \nabla \bullet \mathbf{q}_\alpha = \mathbf{S}_\alpha \quad (\alpha=1,2) \quad (2.63)$$

La loi de Darcy, ou loi de quantité de mouvement dans chaque phase, s'écrit :

$$\mathbf{q}_\alpha = -\rho_\alpha(p_\alpha) \mathbf{K}_\alpha(p_c) [\nabla p_\alpha + \rho_\alpha g \nabla z] \quad (\alpha=1,2) \quad (2.64)$$

#### ♦ Modèles constitutifs $\mathbf{K}(\mathbf{p})$ et $\Theta(\mathbf{p})$

Ces modèles sont les mêmes que ceux présentés dans le §2.4, mais ils doivent être redéfinis ici pour les deux fluides de façon adaptée au problème de l'intrusion saline (voir **Chapitre III**).

#### ♦ Contraintes physiques

##### ○ Contrainte capillaire (fluides mouillant et non mouillant)

La coexistence de deux pressions différentes entre la phase 1 non-aqueuse et la phase 2 aqueuse dans un même volume est expliquée par la tension interfaciale. La tension interfaciale est prise en compte dans la pression capillaire qui dépend de la saturation. L'équilibre de pression au sein d'un même volume, en situation stationnaire, nous donne ainsi :

$$p_c = p_1 - p_2 = f(\Theta_2) \quad (2.65)$$

avec 1 = phase non aqueuse ; 2 = phase aqueuse

##### ○ Contrainte de conservation du volume :

Cette contrainte relie la saturation des deux phases à la porosité effective du milieu. Elle exprime la conservation de masse au sein d'un VER.

$$\theta = \frac{\Theta_1}{\rho_1} + \frac{\Theta_2}{\rho_2} \quad (2.66)$$

#### ♦ Méthode de résolution

Les équations diphasiques peuvent être formulées en pression, en saturation, ou en formulation mixte (pression pour la phase 1 et saturation pour la phase 2). Wu et Forsyth (2001) font une étude comparative pour le choix de la meilleure variable appropriée pour les équations de Richards (milieux non saturés), les équations diphasiques et tri-phases en milieux fortement hétérogènes. Ils recommandent l'utilisation de la formulation en saturation pour l'équation de Richards, une formulation mixte en pression-saturation pour le système diphasique, et une formulation saturation-pression-saturation pour un système tri-phases.

L'équation de Richards correspond bien à un problème diphasique avec deux phases fluides, eau / air, mais avec une seule des deux phases dynamiquement active, l'eau.

### II - 3.3.5 Hypothèses de Ghyben-Herzberg

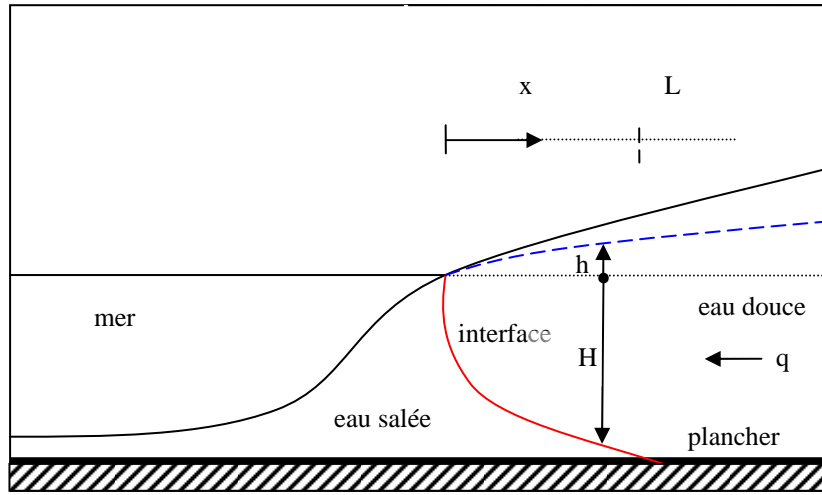
Une série d'hypothèses permet de simplifier le traitement du problème d'intrusion saline dans le cadre de l'approche 'interface abrupte' à deux fluides. Ces hypothèses ont été initialement proposées par Badon-Ghyben (1888), puis ensuite par Herzberg (1901). Elles peuvent se résumer ainsi :

- l'eau salée et l'eau douce sont immiscibles (interface abrupte) ;
- le biseau d'eau salée est considérée comme quasi-hydrostatique ;
- la nappe d'eau douce est supposée verticalement hydrostatique (écoulements plans).

Dans une configuration comme celle de la figure 2.7, avec un exutoire d'eau douce supposé réduit à un point, le principe de Ghyben-Herzberg permet d'obtenir une relation entre 'h' et 'H' :

$$\rho_d g(h + H) = \rho_s gH \quad (2.67)$$

Cette relation est obtenue en imposant la relation de continuité de pression de part et d'autre de l'interface douce/salée, et en appliquant les hypothèses quasi-hydrostatiques précédentes dans les deux nappes (douce et salée). On suppose aussi que la pression atmosphérique est constante.



**Fig.2.7** Aquifère côtier soumis à l'intrusion saline (la mer est à droite).

On en déduit la relation entre la profondeur de l'eau salée (H) et l'épaisseur de la lentille douce (h) :

$$H = \frac{h}{\varepsilon} \quad (2.68)$$

où  $\varepsilon$  est le contraste de densité [-] :  $\varepsilon = \frac{\rho_s - \rho_0}{\rho_0}$  avec, comme valeur indicative  $\varepsilon \approx 1/40$ .

La relation  $H = h/\varepsilon$  sera modifiée plus loin, dans le **Chapitre IV**, de façon à prendre en compte une épaisseur verticale non nulle de l'exutoire de la nappe d'eau douce à la mer, ce qui est évidemment plus réaliste qu'un exutoire de section infinitésimale. En effet, dans ce dernier cas, l'exutoire est un point triple singulier triple ; la vitesse de sortie de l'eau douce à la mer y est infinie même si le débit de sortie de l'eau douce reste fini.

Finalement, en appliquant l'hypothèse de Ghyben-Herzberg à l'un des modèles numériques d'interface abrupte (modèle de suivi d'interface ou modèle diphasique), on voit que l'on peut réduire le problème à deux équations en un problème à une seule équation...moyennant quand même l'approximation assez restrictive d'une zone salée quasi-immobile.



Cependant, on verra que la zone salée peut être évolutive (quasi-équilibre évolutif), et aussi, que l'hypothèse d'écoulements plans dans l'eau douce peut être levée si la continuité de pression à l'interface (cf. **Chapitre III**) est appliquée de façon locale en 3D.

## II - 3.4 Discussions sur les approches de modélisation

Les critères de convergence des modèles de transport en termes de taille de nœuds font qu'ils sont inadaptés pour des simulations détaillées à l'échelle régionale. Johannsen et al. (2002) montrent que, pour obtenir une convergence au sens des grilles numériques <sup>2</sup>, en simulations à densité variable, il faut avoir une très haute résolution, de plus de 18 millions de nœuds pour un cas test 3D de 20×20×20 cm.

## II - 4 CLASSIFICATION DES MODÈLES HYDROGÉOLOGIQUES

Il est difficile d'établir une classification unique des modèles hydrogéologiques. Les critères sont multiples et les combinaisons entre les options de chaque critère sont nombreuses. Ensuite une classification doit répondre à des objectifs prédéfinis dans le cahier de charge du projet de recherche ou d'ingénierie. Dans le tableau 2.2 on présente une sélection de critères de classifications utilisées dans les projets de modélisation des écoulements densitaires et des projets de couplage surface/souterrain. Le tableau 2.3 est un exemple de tableau de classification. Ce tableau est celui du projet de recherche SALTRANS. Dans l'Annexe A on présente une sélection de codes numériques adaptés à la modélisation à densité variable (FEFLOW, SUTRA, etc.) et des modèles adaptés aux écoulements couplés surface/souterrain (Mod HMS, MARTHE).

**Tab 2.2** Sélection de critères de classification des modèles hydrogéologiques.

Critères	OPTIONS				
EQUATIONS D'ÉCOULEMENT	Saturé		Non-saturé		
FORMULATION	Charge capillaire : h		Pression : h		
DIRECT/INVERSE	Simulation directe		Problème inverse, optimisation		
DIMENSION	Profil vertical 1D	Section verticale 2D		2D plan	3D
HÉTÉROGENEITÉ	Quasi-analytique homogène			Hétérogène	
COUPLAGE SURFACIQUE	Couplage fort (voir chapitre 5)			Couplage faible	
COUPLAGE DENSITAIRE	Advection - diffusion			Interface abrupte	
DISCRETISATION SPATIALE	Eléments finis	Différences finies		Volumes finis	Eléments analytiques
TRANSFERT DE CHALEUR	Isotherme			Equations de Fourier couplées	

<sup>2</sup>La convergence au sens des grilles numériques signifie que la solution n'est pas améliorée « significativement » en raffinant le maillage.

COMPOSANTES CHIMIQUES	Pas de composante	Une composante	Multi-composante
SOLVEURS	Direct	Itératif	

**Tab 2.3** Exemple de classification des modèles hydrogéologiques utilisé dans SALTRANS.

Code	AD	EF	S/U	NC	NF	CV	HT	DIM	SD
CODEBRIGHT	*	p	S/U	3C				2/3	FE
d3f	*	p	S/U	1C		*		2/3	FV
FEFLOW	*	h	S/U	1C	*	(*)	*	2/3	FE
HYDRUS-2D	*	h	S/U	MC			*	2	FE
MOCDENSE	*	p	S	2C				2	AE
MOCSENS3D	*	h	S	1C				2/3	AE
PSE2D	*	p	S	1C				2	AE
RETRASO	*	p	S/U	MC			*	2	FE
ROCKFLOW	*	p	S/U	1C			*	2/3	FE
SALTFLOW	*	h	S	1C				2/3	FE
SEAWAT	*	h	S	MC				2/3	FD/AE
SUTRA/SUTRA3D	*	h/p	S/U	1C		*	*	2/3	FE
TRANSDENSE	*	h	S/U	1C		*		2/3	FE

AD – Advection-Dispersion model

EF – Equation Formulation in terms of h = head, p = pressure

S/U – Saturated/Unsaturated

NC – Number of Components, MC = Multicomponent

NF – Non-Fickian dispersion

CV – Consistent Velocity approximation

HT – Heat Transport

DIM – Dimensions

SD – Spatial Discretization, FE = Finite Element, FD = Finite Difference, FV = Finite Volume, AE = Analytical Element

# **Chapitre III    DEVELOPPEMENT D'UN MODELE 3D D'INTRUSION SALINE AVEC INTERFACE ABRUPTTE ET ZONE SALEE QUASI-STATIQUE**

### **TABLE DES MATIERES DU CHAPITRE III**

<b>III - 1</b>	<b>Introduction</b>	<b>39</b>
<b>III - 2</b>	<b>Formulation en 3D de l'intrusion saline avec zone salée quasi-statique</b>	<b>39</b>
III - 2.1	Equations de conservation de masse et de conservation de QDM	39
III - 2.2	Conditions dynamiques au niveau de l'interface	39
III - 2.3	Hypothèse d'une zone salée quasi-hydrostatique	41
<b>III - 3</b>	<b>Développement et paramétrisation d'un modèle de propriétés hydrauliques non-linéaires équivalentes pour l'intrusion saline</b>	<b>41</b>
III - 3.1	Zones d'écoulement	41
III - 3.2	Courbes de rétention et de conductivité	42
III - 3.3	Capacité et Diffusivité	44
<b>III - 4</b>	<b>Solution numérique au problème de l'anti-diffusion</b>	<b>45</b>
III - 4.1	Courbe de rétention modifiée	45
III - 4.2	Courbe de conductivité modifiée	47
<b>III - 5</b>	<b>Validation avec la solution analytique de Glover 1964</b>	<b>48</b>
III - 5.1	Configuration du problème	50
III - 5.2	Position de l'interface	50
III - 5.3	Courbes de rétention	51
<b>III - 6</b>	<b>Comparaison avec le problème de Henry</b>	<b>52</b>
<b>III - 7</b>	<b>Conclusions</b>	<b>54</b>

### III - 1 INTRODUCTION

Dans ce chapitre un modèle d'intrusion saline à interface abrupte est proposé. Ce modèle est basé sur l'approche multiphasique à un fluide évoquée dans le chapitre 2. Contrairement à l'approche multiphasique à deux fluides avec une pseudo capillarité proposée par Huyakorn (1996) seul l'écoulement dans l'eau douce est modélisé. L'approche consiste à adapter le modèle d'écoulement non-saturé basé sur les équations de Richards aux problèmes de l'intrusion saline. Dans ce modèle le domaine est divisé en trois zones : la zone saturée en eau douce, la zone non-saturée, et la zone saturée en eau salée. La division du domaine se fait à l'aide des courbes de rétention adaptées. L'écoulement en zone salée est considéré comme quasi-statique. La zone salée est considérée comme une zone dépourvue d'eau douce et qui s'adapte automatiquement aux variations de l'écoulement dans la zone d'eau douce. L'adaptation se fait en appliquant la condition de flux nul et de continuité de pression à l'interface entre l'eau douce et l'eau salée. Cette approche a été proposée par Larabi et De Smedt (1997), Sbai (1999), et Aharmouch (2003) avec des courbes de retentions qui présente un problème d'anti-diffusion. Dans notre modèle le problème de l'anti-diffusion qui apparaît au niveau de la transition entre la zone eau douce / eau salée est traité en proposant des courbes de retentions adaptées.

### III - 2 FORMULATION EN 3D DE L'INTRUSION SALINE AVEC ZONE SALEE QUASI-STATIQUE

#### III - 2.1 Equations de conservation de masse et de conservation de QDM

La formulation multiphasique du problème de l'intrusion dans le cas où les deux fluides sont actifs (mobiles) est basée sur la solution simultanée des équations des écoulements des deux fluides assimilées à deux phases (Huyakorn 1996, Bear 1999).

L'équation de conservation de mass pour chaque phase s'écrit :

$$\frac{\partial \Theta_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot \nabla \mathbf{q}_\alpha = \mathbf{S}_\alpha \text{ avec } \alpha=1,2 \quad (3.1)$$

La loi de quantité de mouvement de Darcy pour chaque phase s'écrit :

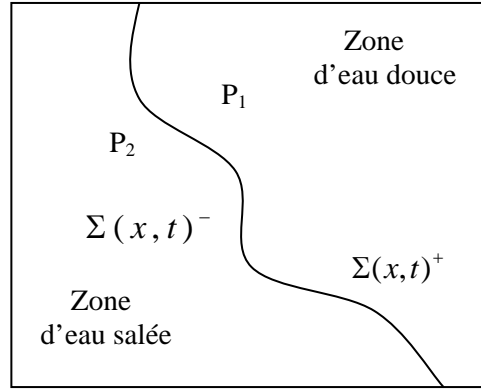
$$\mathbf{Q}_\alpha = -\rho_\alpha(p_\alpha) \mathbf{K}_\alpha(p_c) [\nabla p_\alpha + \rho_\alpha g \nabla z] \text{ avec } \alpha=1,2 \quad (3.2)$$

Les deux fluides non miscibles (eau douce et eau salée) sont assimilés à deux phases. En plus la troisième phase (air) est considérée de façon implicite dans chacune des deux phases. Cette troisième phase est considérée comme non-active.

#### III - 2.2 Conditions dynamiques au niveau de l'interface

Pour coupler ces deux équations il faut définir des conditions dynamiques et cinétiques au niveau de l'interface. Les courbes de rétention seront ensuite modifiées pour répondre aux conditions. La condition dynamique au niveau de l'interface est donnée par la continuité de la pression à travers l'interface (voir figure 3.1):

$$P_1 = P_2 \text{ en } \Sigma(x, t) \quad (3.3)$$



**Fig. 3.1** Représentation de l'interface abrupte entre la zone d'eau salée et la zone d'eau douce.

On associe à chaque fluide la charge hydraulique donnée par :

$$H_1 = \frac{p_1 - p_{atm}}{\rho_1 g} + z = h_1 + z \text{ et } H_2 = \frac{p_2 - p_{atm}}{\rho_2 g} + z = h_2 + z \quad (3.4) \text{ et } (3.5)$$

Au niveau de l'interface la condition dynamique se traduit alors par:

$$\frac{p_1 - p_{atm}}{\rho_1 g} = \frac{p_2 - p_{atm}}{\rho_1 g} \text{ en } \Sigma(x, t) \quad (3.6)$$

A partir de cette définition on peut définir les pressions critiques pour chaque fluide pour lesquelles la condition dynamique est vérifiée. La pression critique exprime un état statique où l'eau douce et l'eau salée sont en équilibre. Dans ce cas seule la diffusion moléculaire existe. Mais cette diffusion faible par rapport à la taille du domaine est négligée.

- Pour le fluide 1 (eau douce) la valeur de la pression critique est donnée par :

$$h_{1crit} = \frac{\rho_2}{\rho_1} \frac{p_2 - p_{atm}}{\rho_2 g} = (1 + \varepsilon) (H_2(x, y, z, t) - z) \text{ en } \Sigma(x, t)^+ \quad (3.7)$$

- Pour le fluide 2 (eau salée) on a :

$$h_{2crit} = \frac{\rho_1}{\rho_2} \frac{p_1 - p_{atm}}{\rho_1 g} = (H_1(x, y, z, t) - z) / (1 + \varepsilon) \text{ en } \Sigma(x, t)^- \quad (3.8)$$

Si la pression dans un des fluides dépasse la pression critique, il peut potentiellement envahir l'autre fluide. On peut ainsi définir le potentiel d'invasion. Le potentiel d'invasion de l'eau douce dans l'eau salée en chaque point est donné par :

$$h_{pf} = h_{p1} = (h_{1crit} - h_1) \text{ ou } H_{pf} = (H_{1crit} - H_1) \quad (3.9)$$

Le potentiel d'invasion de l'eau salée dans la zone d'eau douce est donné par :

$$h_{ps} = h_{p2} = (h_{2crit} - h_2) \text{ ou } H_{ps} = (H_{2crit} - H_2) \quad (3.10)$$

Si en un point de l'interface,  $h_{pf}$  ou  $h_{ps}$  ne sont pas nuls, alors ce point de l'interface n'est pas en équilibre dynamique. Ainsi les potentiels d'invasion peuvent être utilisés comme paramètres dans les courbes de rétention pour définir de façon implicite la transition entre la zone d'eau douce et d'eau salée. La résolution itérative ou simultanée des deux équations avec les courbes de rétention ainsi définies donnera la position finale de l'interface sans avoir recours à des méthodes sophistiquées de suivi d'interface et d'imposition de condition limite interne avec remaillage.

### III - 2.3 Hypothèse d'une zone salée quasi-hydrostatique

On considère maintenant que la zone salée est immobile par intervalle de temps. La zone d'eau salée s'adapte de façons systématiques aux variations de pression au niveau de l'interface. Cette hypothèse est applicable :

- si le temps caractéristique des variations des conditions limites est très différent du temps caractéristique de l'écoulement ;
- s'il n'y a pas de puits de pompage dans la zone salée. Les puits fortement touchés par l'intrusion saline sont abandonnés.

Alors l'équation de l'écoulement de l'eau salée est négligée, et la pression dans la zone d'eau salée est remplacée par la pression hydrostatique de la mer  $H_{SEA}$ .

$$h_{1crit} \approx (1 + \varepsilon) (H_2^{SEA} - z) \quad (1: \text{eau douce et } 2: \text{eau salée}) \quad (3.11)$$

Cette relation est identique à la formulation de Ghyben-Herzberg dans la zone salée mais elle est différente dans la zone d'eau douce qui n'est pas verticalement intégrée. Aucune hypothèse n'est formulée pour la zone d'eau douce, i.e., l'écoulement dans la zone d'eau douce est 3D non-hydrostatique.

## III - 3 DEVELOPPEMENT ET PARAMETRISATION D'UN MODELE DE PROPRIETES HYDRAULIQUES NON-LINEAIRES EQUIVALENTES POUR L'INTRUSION SALINE

### III - 3.1 Zones d'écoulement

En suivant l'hypothèse de Ghyben-Herzberg, le domaine est divisé en trois zones :

- la zone 1 non-saturée où la pression est négative à cause de la succion :

$$h(x,t) < 0 \quad (3.12)$$

- la zone 2 d'eau douce définie par une pression positive plus faible que la pression de la zone salée hydrostatique.

$$0 \leq h(x,t) \leq h_{crit} \quad (3.13)$$

- la zone 3 d'eau salée définie par une pression supérieure à la pression hydrostatique critique. Cette zone est saturée en eau salée. Dans ce modèle la zone salée est une zone imperméable à l'eau douce donc qui ne contient pas de l'eau douce. L'eau salée n'est présente que conceptuellement. Cette zone a une teneur nulle en eau douce.

$$h(x,t) > h_{crit} \quad (3.14)$$

### III - 3.2 Courbes de rétention et de conductivité

Les courbes de rétention et de conductivité sont changées pour prendre en compte cette modification. Les courbes proposées doivent traduire la dynamique de l'écoulement de l'eau douce en incluant les pressions critiques. La première est la pression critique qui définit la zone de frange capillaire. La deuxième est la pression critique qui définit l'interface entre l'eau douce et l'eau salé. Dans un premier lieu on propose des courbes de rétention qui peuvent décrire les deux transitions. Ainsi la courbe de la teneur en eau du modèle de Van Genuchten Mualem devient :

$$\begin{aligned}
 &\text{pour } h < 0 & \frac{\theta - \theta_d}{\theta_s - \theta_d} &= \left[ \frac{1}{1 + (-\alpha h)^n} \right]^m \\
 &\text{pour } 0 \leq h \leq h_{\text{crit}} & \theta &= \theta_s \\
 &\text{pour } h > h_{\text{crit}} & \frac{\theta}{\theta_s} &= \left[ \frac{1}{1 + (-\alpha h_{pf})^{n'}} \right]^{m'} \text{ avec } h_{pf} = h_{\text{crit}} - h
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

La courbe de la teneur en eau pour le modèle exponentiel devient :

$$\begin{aligned}
 &\text{pour } h < 0 & \frac{\theta - \theta_d}{\theta_s - \theta_d} &= e^{\beta(h-h_b)} \\
 &\text{pour } 0 \leq h \leq h_{\text{crit}} & \theta &= \theta_s \\
 &\text{pour } h > h_{\text{crit}} & \frac{\theta}{\theta_s} &= e^{\beta(h_{pf}-h_b)} \text{ avec } h_{pf} = h_{\text{crit}} - h
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

La courbe de conductivité pour le modèle de Van Genuchten Mualem est donnée par :

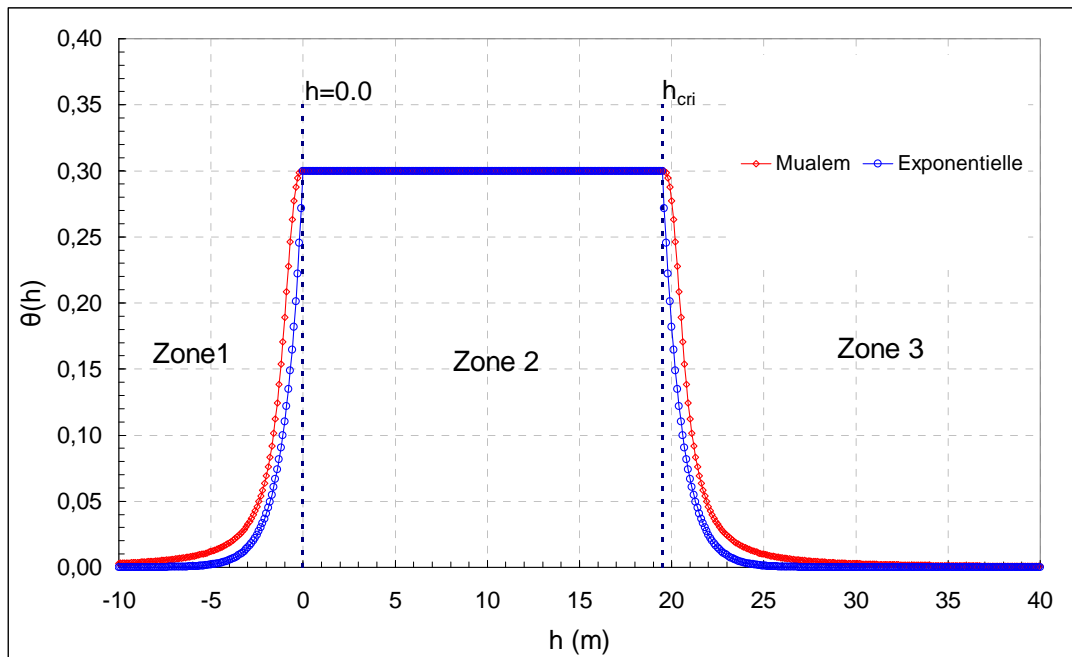
$$\begin{aligned}
 &\text{pour } h < 0 & \frac{K - K_r}{K_s - K_r} &= \frac{1}{\left(1 + (-\alpha h)^n\right)^{-m/2}} \left( 1 - \left[ 1 - \frac{1}{\left(1 + (-\alpha h)^n\right)} \right]^m \right)^2 \\
 &\text{pour } 0 \leq h \leq h_{\text{crit}} & K &= K_{\text{sat}} \\
 &\text{pour } h > h_{\text{crit}} & \frac{K - K_r}{K_s - K_r} &= \frac{1}{\left(1 + (-\alpha h_{pf})^n\right)^{-m/2}} \left( 1 - \left[ 1 - \frac{1}{\left(1 + (-\alpha h_{pf})^n\right)} \right]^m \right)^2 \\
 && &\text{avec } h_{pf} = h_{\text{crit}} - h
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

La courbe de conductivité pour le modèle exponentiel est donnée par :

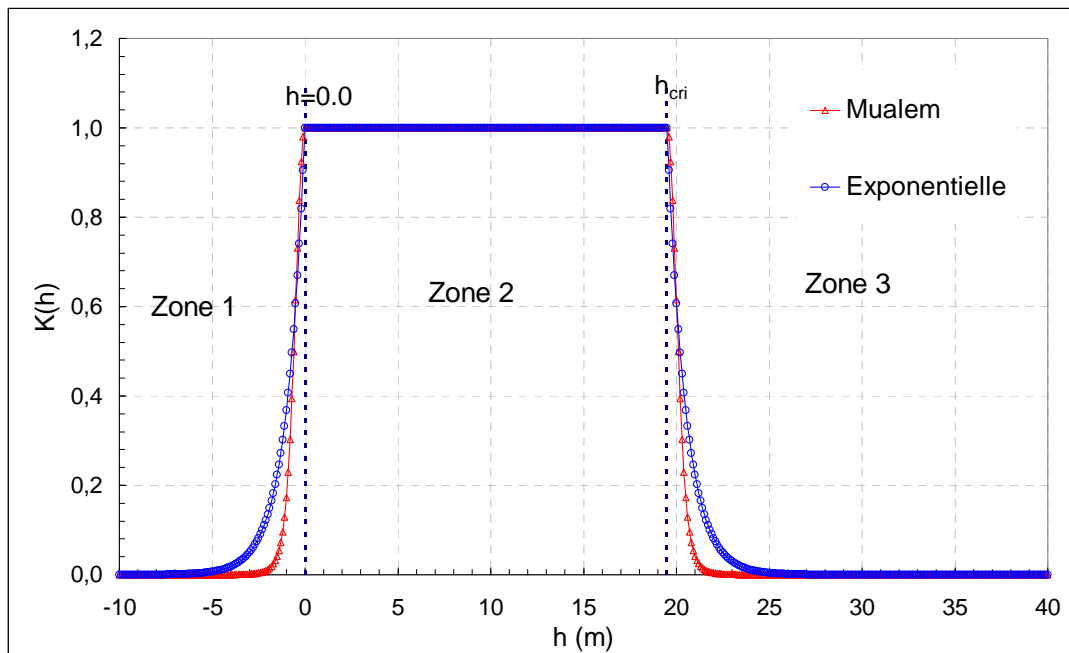
$$\begin{aligned}
 &\text{pour } h < 0 & \frac{K - K_r}{K_s - K_r} &= e^{\alpha(h-h_b)} \\
 &\text{pour } 0 \leq h \leq h_{\text{crit}} & K &= K_{\text{sat}} \\
 &\text{pour } h > h_{\text{crit}} & \frac{K - K_r}{K_s - K_r} &= e^{\alpha(h_{pf}-h_b)} \text{ avec } h_{pf} = h_{\text{crit}} - h
 \end{aligned} \tag{3.18}$$



On voit dans les figures 3.2 et 3.3 les courbes de teneur en eau et de conductivité hydraulique respectivement et pour les modèles Van Genuchten Mualem et exponentiel. Les différentes zones (1,2 et 3) obtenues sont indiquées sur la figure 3.6.



**Fig. 3.2** Première proposition de courbes de rétention pour le modèle de l'intrusion saline en 3D.



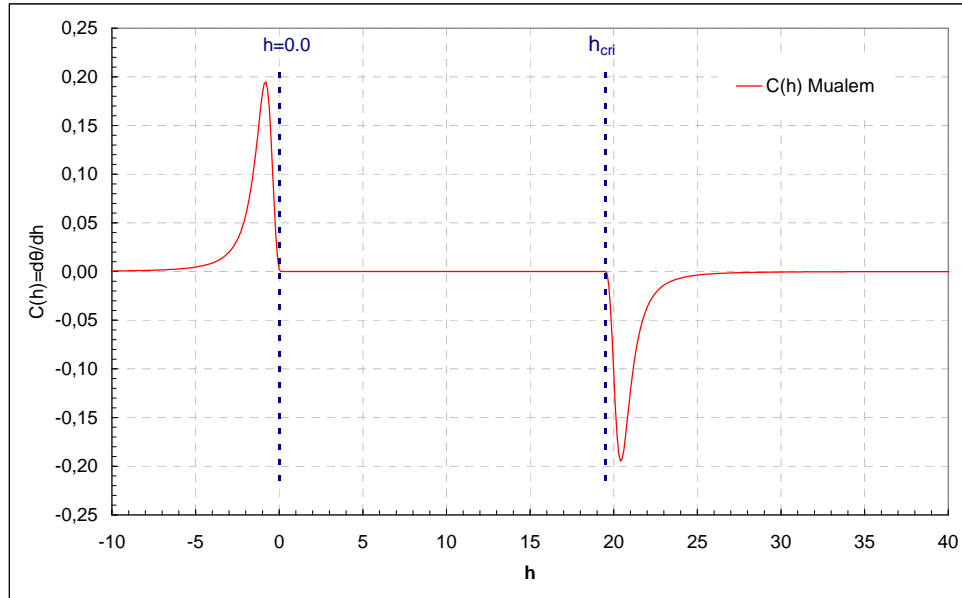
**Fig. 3.3.** Première proposition de courbes de conductivité pour le modèle de l'intrusion saline en 3D.

### III - 3.3 Capacité et Diffusivité

Dans la suite de ce paragraphe, on calcule la capacité (figure 3.4) et la diffusivité dans le cas du modèle de Van Genuchten Mualem. On montre que le modèle proposé induit une diffusivité négative au niveau de la transition de la zone 2 saturée en eau douce à la zone 3 saturée en eau salée.

La capacité définit par  $C(h) = \frac{d\theta}{dh}$  donne dans le cas de Van Genuchten Mualem :

$$\begin{aligned}
 &\text{pour } h < 0 & C(h) &= \frac{mn \alpha (\theta_s - \theta_d) (-\alpha h)^{n-1}}{[1 + (-\alpha h)^n]^{m+1}} \\
 &\text{pour } 0 \leq h \leq h_{\text{crit}} & C(h) &= 0 \\
 &\text{pour } h > h_{\text{crit}} & C(h) &= -\frac{mn \alpha (\theta_s - \theta_d) (-\alpha h_{\text{pf}})^{n-1}}{[1 + (-\alpha h_{\text{pf}})^n]^{m+1}} \\
 && \text{avec } h_{\text{pf}} &= h_{\text{crit}} - h
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

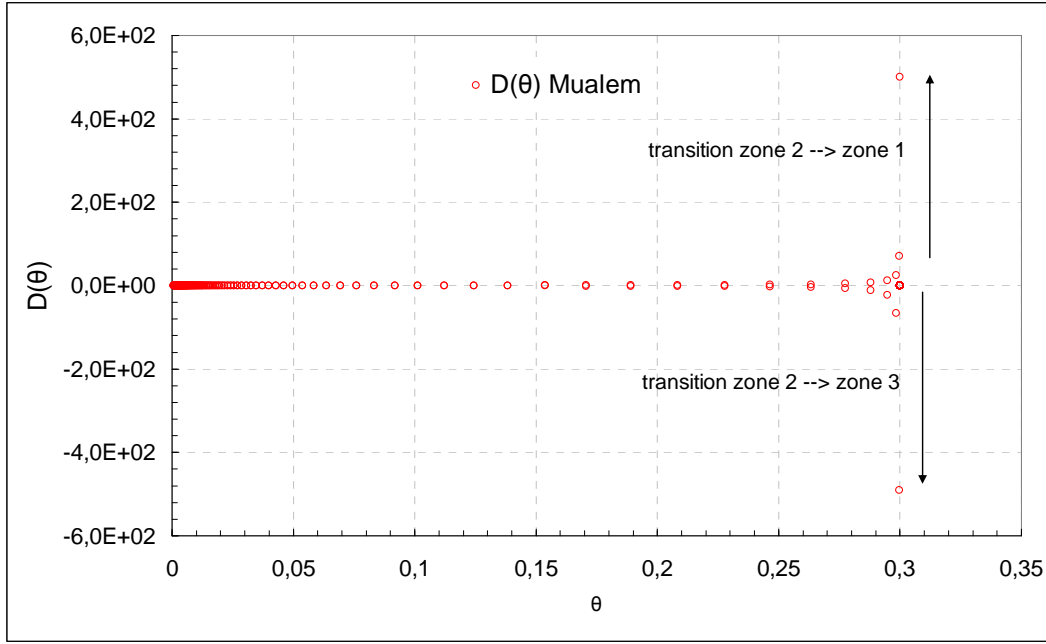


**Fig. 3.4** Capacité obtenue pour le premier modèle de Van Genuchten Mualem proposé.

A partir de la capacité on calcule la diffusivité donnée par :

$$D(h) = \frac{C(h)}{k(h)} \tag{3.20}$$

Etant donné que la capacité est négative sur la transition de la zone 2 vers la zone 3 et de la zone 3 vers la zone 2, la diffusivité sera aussi négative (voir figure 3.5). Ce résultat est fortement contraignant car il implique des valeurs diagonales négatives dans la matrice du système linéaire. Ainsi la matrice symétrique du système n'est plus définie positive et la solution de la matrice n'est plus stable.



**Fig. 3.5** Diffusivité obtenue pour le premier modèle de Van Genuchten Mualem proposé.

### III - 4 SOLUTION NUMERIQUE AU PROBLEME DE L'ANTI-DIFFUSION

Pour palier au problème de l'anti-diffusion obtenu par la conception même des courbes de rétention, de nouvelles courbes de rétention sont définies. Ces courbes permettent d'obtenir le même effet que les courbes définies dans le paragraphe précédent mais en contournant le problème de l'anti-diffusion par un Dirac au niveau de l'interface.

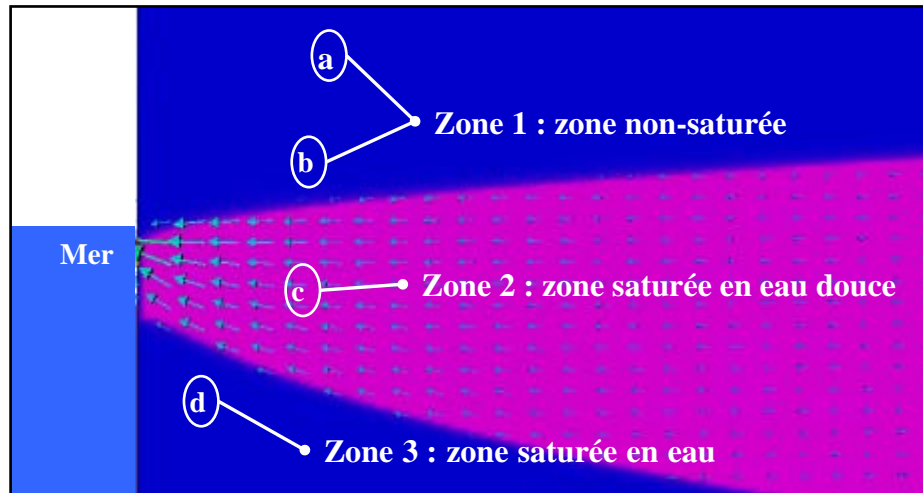
#### III - 4.1 Courbe de rétention modifiée

Les nouvelles courbes de teneur en eau pour le modèle de van Genuchten Mualem sont définies de la manière suivante :

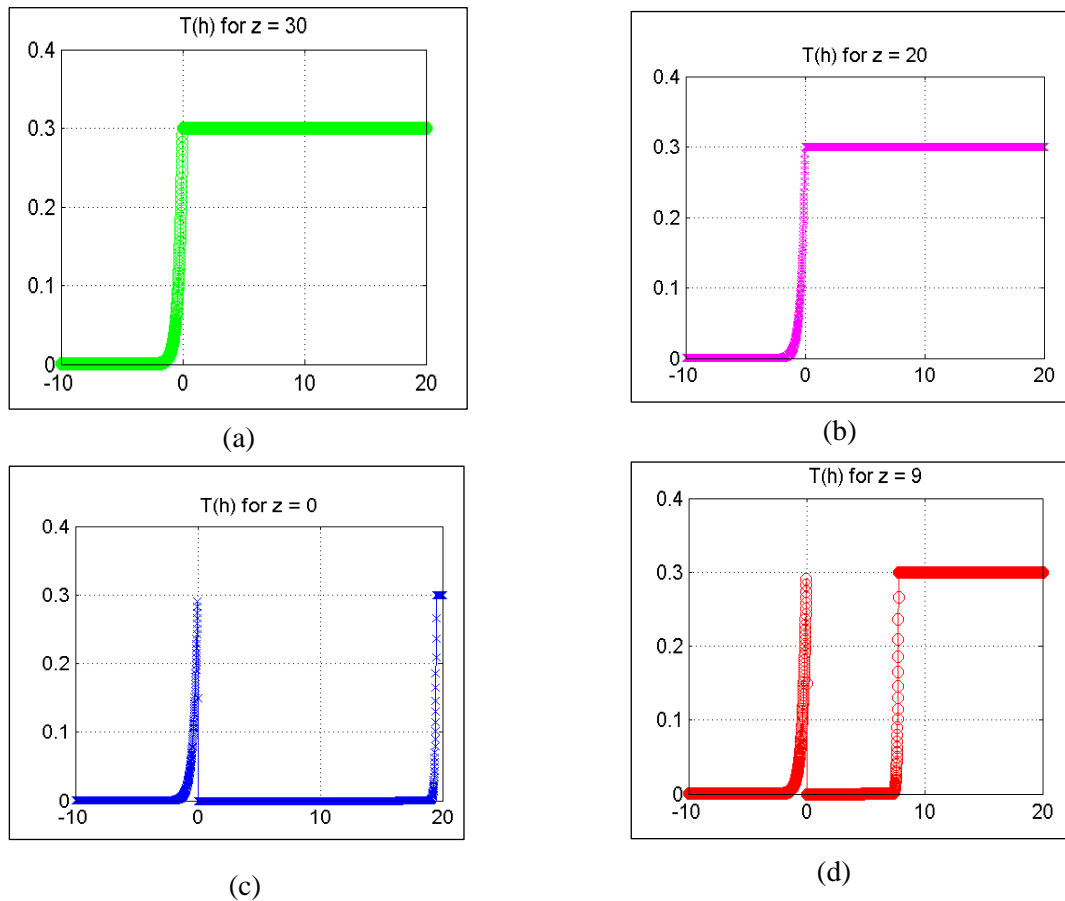
$$\text{pour } h < 0 \quad \frac{\theta - \theta_d}{\theta_s - \theta_d} = \left[ \frac{1}{1 + (-\alpha h_{e1})^n} \right]^m \quad \text{avec } h_{e1} = \min(h, 0) \quad (3.21)$$

$$\text{pour } h \geq 0 \quad \frac{\theta - \theta_d}{\theta_s - \theta_d} = \left[ \frac{1}{1 + (-\alpha h_{e2})^{n'}} \right]^{m'} \quad \text{avec } h_{e2} = \min(h - h_{crit}, 0)$$

Etant donné que  $h_{crit}$  dépend de la position et plus spécifiquement de l'élévation, il existe plusieurs courbes de rétention. La figure 3.6 présente les positions des courbes obtenues par rapport à la configuration de l'aquifère. La figure 3.7 montre les courbes de  $\theta(h)$  pour plusieurs positions en élévation ou profondeur dans un aquifère de 30 m de profondeur



**Fig. 3.6** Localisation des positions pour lesquelles les courbes de rétention, de conductivité et diffusivité sont montrées dans les figures 3.7, 3.8 et 3.9 respectivement.



**Fig. 3.7** Courbes de rétention de Van Genuchten Mualem modifiées pour le problème de l'intrusion saline 3D.

### III - 4.2 Courbe de conductivité modifiée

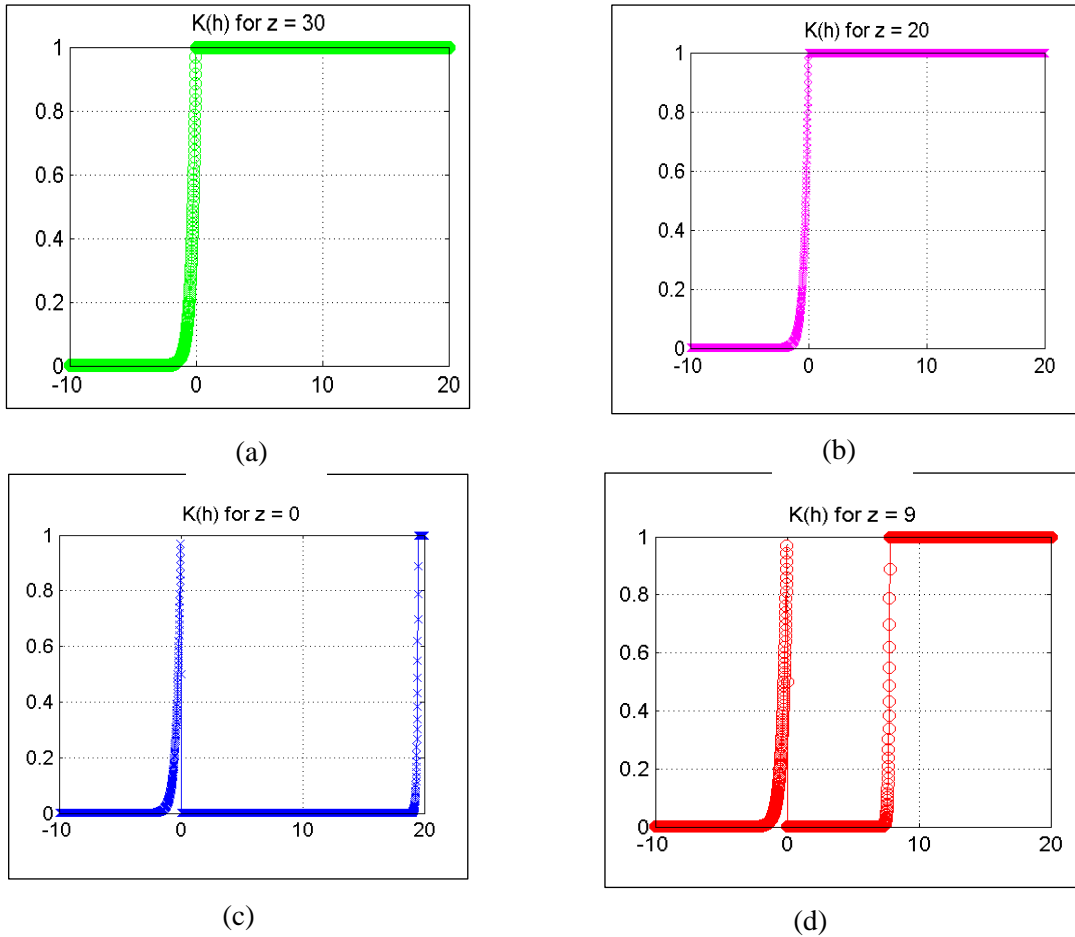
De façon analogue on peut définir les courbes de conductivité  $K(h)$  modifiées à partir du modèle de Van Genuchten Mualem :

$$\text{pour } h < 0 \quad \frac{K - K_r}{K_s - K_r} = \frac{1}{\left(1 + (-\alpha h_{e1})^n\right)^{-m/2}} \left(1 - \left[1 - \frac{1}{\left(1 + (-\alpha h_{e1})^n\right)}\right]^m\right)^2 \quad (3.22)$$

avec  $h_{e1} = \min(h, 0)$

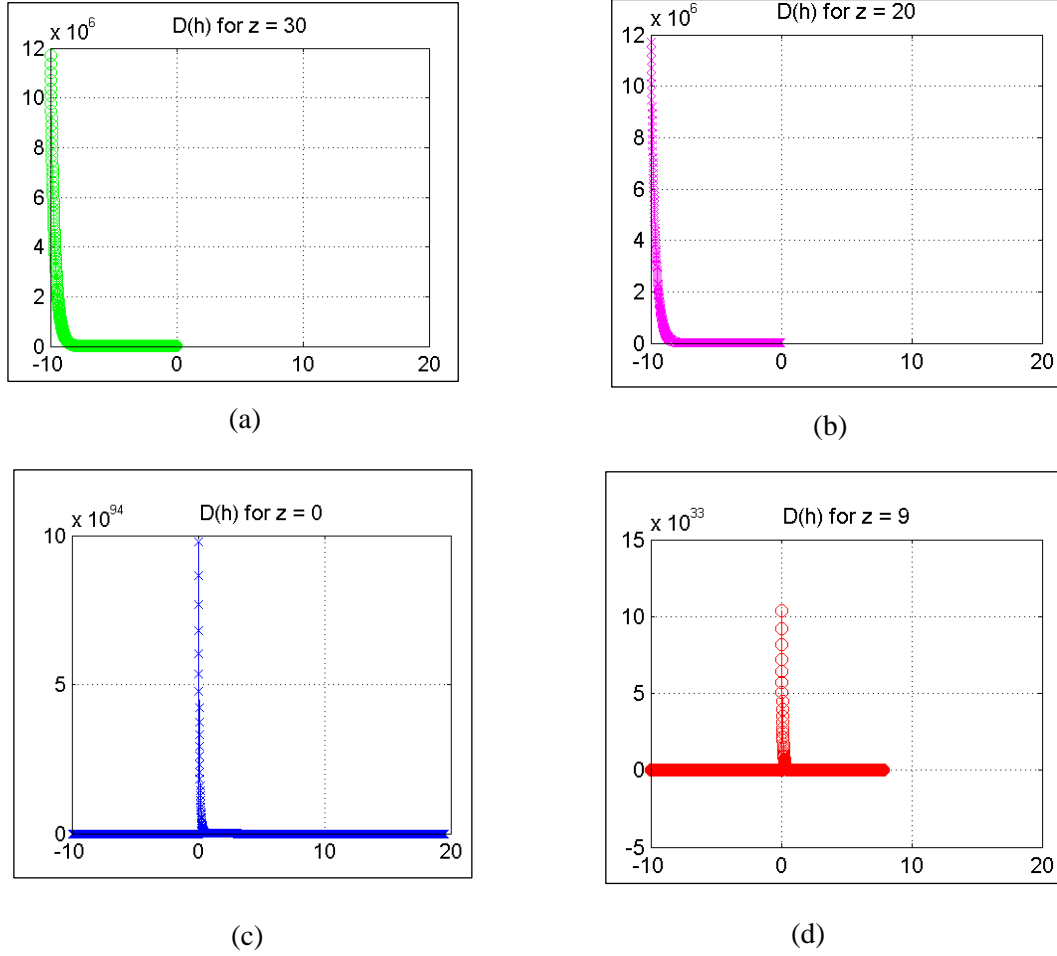
$$\text{pour } h \geq 0 \quad \frac{K - K_r}{K_s - K_r} = \frac{1}{\left(1 + (-\alpha h_{e2})^n\right)^{-m'/2}} \left(1 - \left[1 - \frac{1}{\left(1 + (-\alpha h_{e2})^n\right)}\right]^{m'}\right)^2$$

avec  $h_{e2} = \min(h - h_{crit}, 0)$



**Fig. 3.8** Courbes de conductivité de Van Genuchten Mualem modifiées pour le problème de l'intrusion saline 3D.

La diffusion théorique obtenue à partir des courbes précédentes est montrée dans la figure 3.9. On remarque que la diffusion ne présente plus des valeurs négatives.

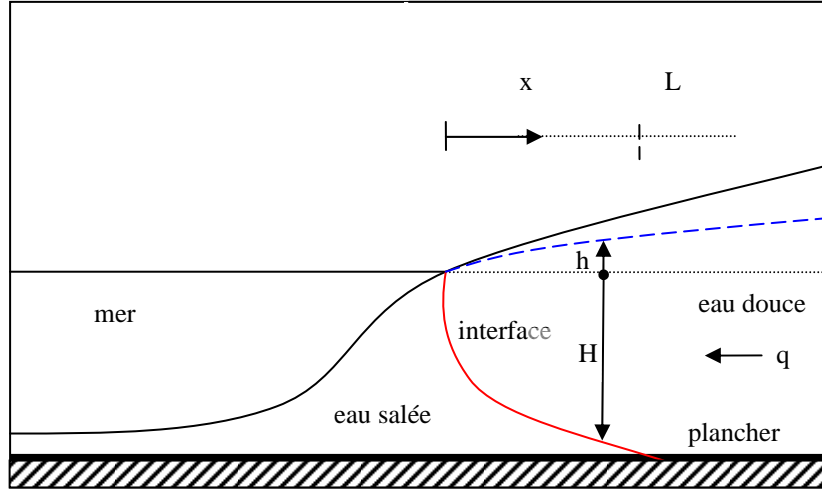


**Fig. 3.9** Courbes de diffusivité du modèle de Mualem modifié pour le problème de l'intrusion saline 3D.

### III - 5 VALIDATION AVEC LA SOLUTION ANALYTIQUE DE GLOVER 1964

Le modèle est validé face à la solution analytique de GLOOVER 1964 en symétrie plane (problème de Glover). On peut le traiter soit comme un écoulement à débit fixé, soit comme un problème à deux réservoirs (salé à gauche, eau douce à droite). Le flux de la nappe d'eau douce vers la côte,  $q$ , peut être du à une différence de charge, c'est-à-dire un gradient hydraulique régional  $J = -\text{grad } H$ , dirigé vers la côte.

La solution est obtenue par résolution de l'EDP du problème d'intrusion saline avec l'hypothèse de Ghyben-Herzberg en 1D en appliquant les conditions limites du problème aux résultats généraux de la première partie dans le cas de la symétrie plane. De cette manière on détermine toutes les constantes inconnues.



**Fig. 3.10** Représentation de la solution analytique de Glover.

- **Dans la zone du coin salé  $0 < x < L$**

La résolution de l'EDP du problème permet d'obtenir les profils  $h(x)$  et  $H(x)$ .

$$h(x) = \sqrt{-\frac{2\epsilon qx}{K(\epsilon + 1)}} \quad (3.23) \text{ et } (3.24)$$

$$H(x) = \sqrt{-\frac{2qx}{K\epsilon(\epsilon + 1)}}$$

- **Longueur de pénétration du coin salé (L) :**

On peut déterminer la longueur L du coin salé (L est la distance par rapport à la mer de l'intersection entre l'interface salée et le plancher de l'aquifère).

$$\text{En } x=L, H(L)=H_0 \Rightarrow L = \frac{-K\epsilon(\epsilon + 1)H_0^2}{2q}$$

- **Profils pour  $x > L$  (au-delà de la zone du coin salé, vers l'intérieur des terres) :**

Si on veut déterminer la forme de la nappe pour  $x > L$ , il faut réécrire la loi de Darcy intégrée verticalement comme suit :

$$q = -K(h + H_0) \frac{\partial h}{\partial x}$$

De plus on a la condition limite en  $x=L$  :  $h(L)=\epsilon H_0$

En intégrant, on obtient pour  $x > L$  :

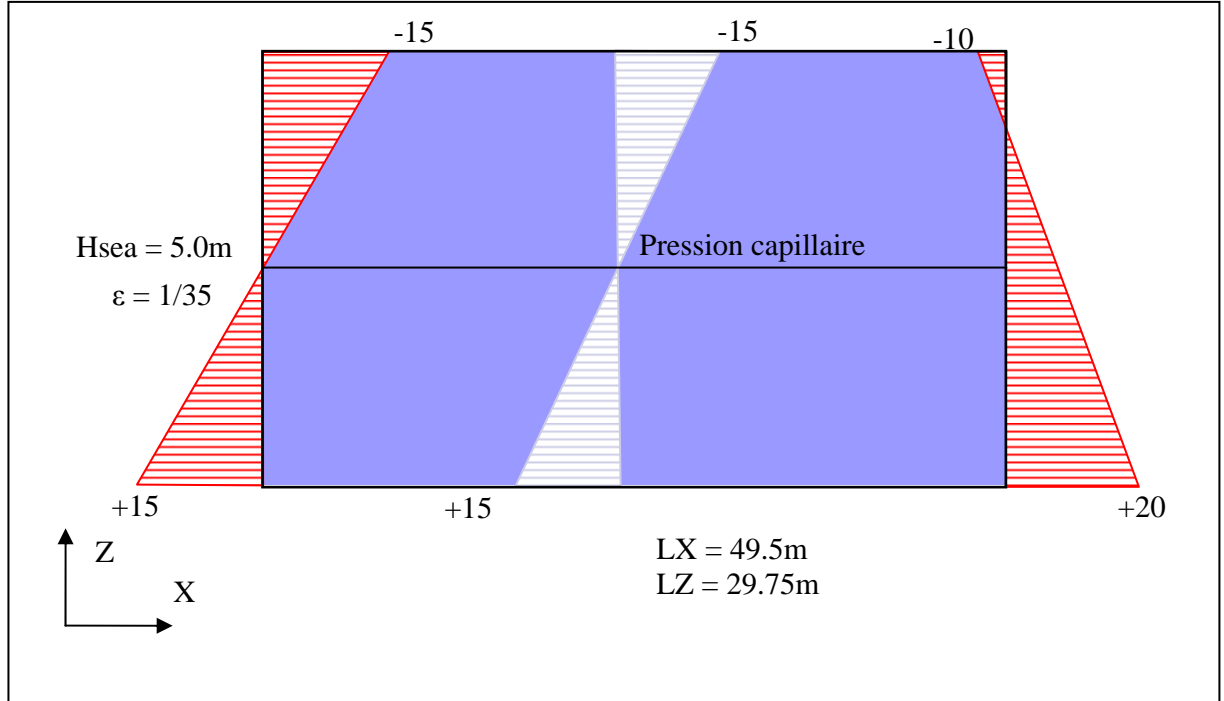
$$h(x) = \sqrt{H_0^2(1 + \epsilon)^2 - \frac{2q}{K}(x - L)} - H_0 \quad (3.25)$$

Cette solution correspond à une certaine interprétation du problème de Glover (1964), cité par exemple dans Cheng *et* Ouazar (2003).

### III - 5.1 Configuration du problème

On considère un domaine rectangulaire en section vertical et mince. Le domaine est constitué de  $100 \times 120 \times 3$  nœuds dans les coordonnées  $X$ ,  $Y$  et  $Z$  respectivement. La discrétisation du domaine est de  $\Delta x = 0.5$  m et  $\Delta y = 1.0$  m et  $\Delta z = 0.25$  m.

On impose une condition de charge constante en  $x = 0$  et en  $x = 49.5$  et une condition de flux nulle sur toutes les autres faces du domaine (voir figure 3.11). La condition initiale correspond à une distribution hydrostatique de pression dans le milieu poreux avec une surface libre ( $h = 0$ ) au milieu du domaine. Le niveau de la mer est de  $H_{sea} = 15$  m et le contraste de densité est de  $1/35$ .



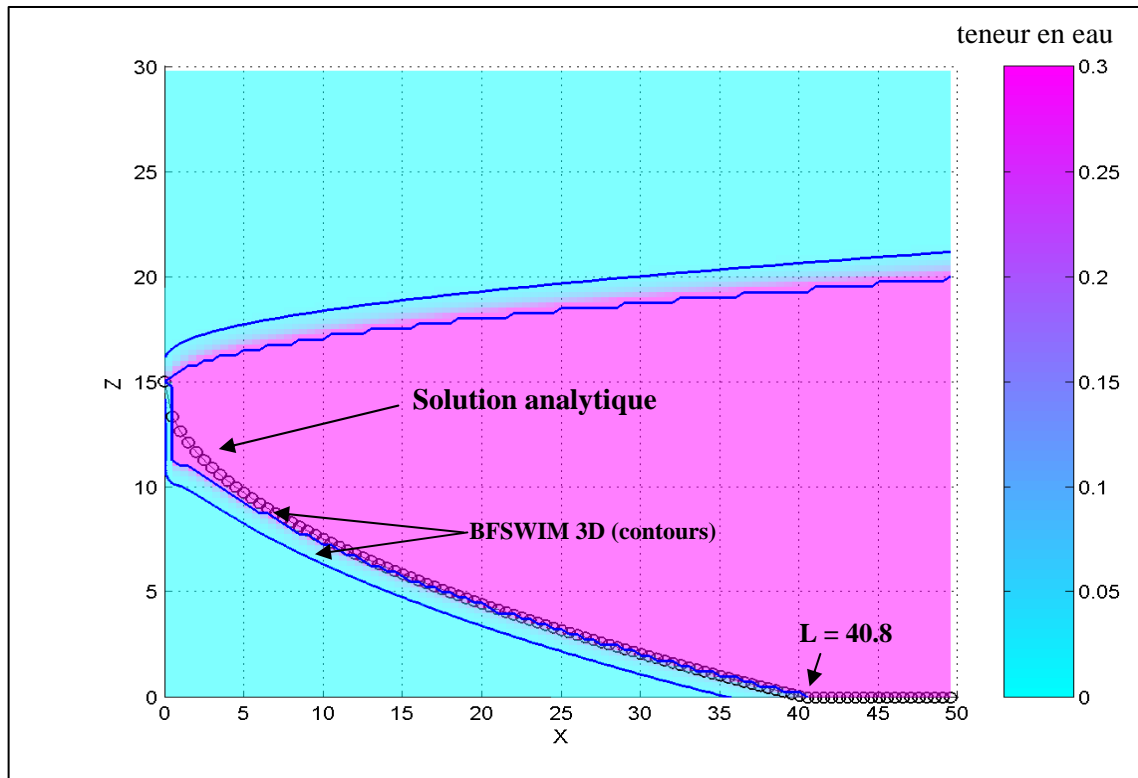
**Fig. 3.11** Configuration du problème de Gloover pour le cas test.

### III - 5.2 Position de l'interface

La figure 3.12 représente la position de l'interface obtenue par la solution de Gloover et la solution numérique obtenue par BIGSWIM. La solution numérique est représentée par deux iso-ligne. La première représente la valeur à saturation et la deuxième représente le milieu sec. C'est la valeur à saturation qui sert de référence face à la solution de Gloover.

Le calcul de l'intersection de l'interface avec le substratum de la solution numérique et de la solution analytique donne la même valeur de  $40.803$  m à  $10^{-3}$  m près.



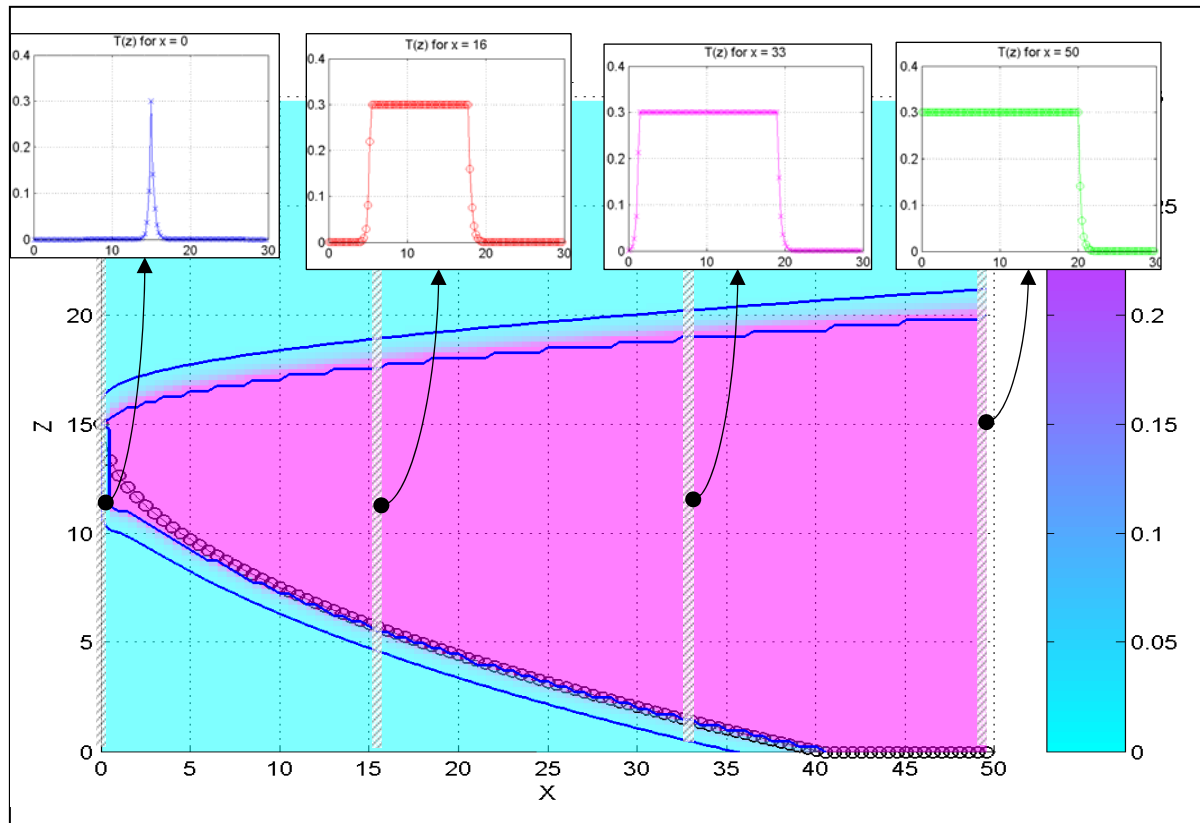


**Fig. 3.12** Résultats de la simulation numérique avec BIGFLOW SWIM3D et la solution analytique de Glover (1964).

### III - 5.3 Courbes de rétention

Dans la figure 3.13, on remarque que les courbes de retentions obtenue correspondre vraiment aux courbes initialement proposées pour le problème et qui ont été modifiées pour le palier au problème de l'anti-diffusion. Ainsi la solution numérique proposée n'affecte pas la solution finale obtenue. La validité des résultat est confirmé par des bon résultats numériques de convergence du solveur et de conservation de mass ( $<0.03\%$ ).

Par contre on remarque une singularité au niveau de l'exutoire des courbes de retentions. Cette singularité est due à l'épaisseur imposée par solution analytique de l'exutoire dans la définition des courbes de rétention. L'implémentation d'une méthode de réactualisation de cette valeur serait plus convenable et réaliste pour résoudre ce problème. Notons que ce type de problème est aussi rencontré dans les modèles de transport advection et diffusive et qu'il est résolu par une approche de réactualisation (Essink 2001).



**Fig. 3.13** Courbes de rétention obtenue numériquement sur plusieurs sections du domaine.

### III - 6 COMPARAISON AVEC LE PROBLEME DE HENRY

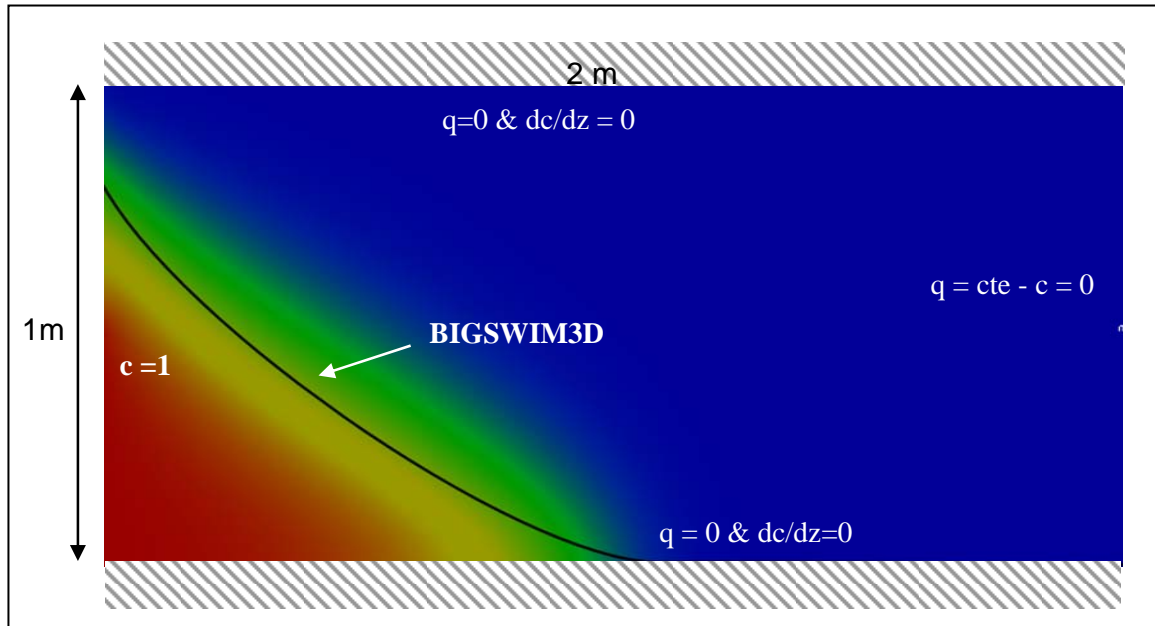
Dans ce deuxième test, notre modèle interface abrupte 3D est comparé à une solution numérique du 'problème de Henry' (Henry 1964). Ce problème a été repris par de nombreux auteurs, qui l'ont résolu soit par la méthode quasi-analytique de Henry, soit par des méthodes numériques de type différences finies, volumes finis ou éléments finis (Segol et al. 1975, Frind 1982, Huyakorn et al. 1987 et Voss et Souza 1987). Ici, nous avons utilisé en coupe verticale, le code de calcul FEFLOW pour résoudre les équations couplées du problème de Henry en termes de concentration de sel. Les principales caractéristiques du problème sont les suivantes :

- ◆ Taille du domaine (x,z) : 2m de longueur × 1 m de hauteur
- ◆ Conditions limites du problème de Henry :
  - Frontière du haut : flux nul,  $dC/dz = 0$
  - Frontière du bas : flux nul,  $dC/dz = 0$
  - Latérale gauche : charge fixé,  $c=1$
  - Latérale droite : flux fixé,  $c=0$
- ◆ Conductivité hydraulique isotrope et homogène :  $K = 0.01 \text{ m/s}$  ;
- ◆ Coefficient de diffusion 'moléculaire' :  $D = 6.6 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ .
- ◆ Porosité :  $0.35 \text{ m}^3/\text{m}^3$

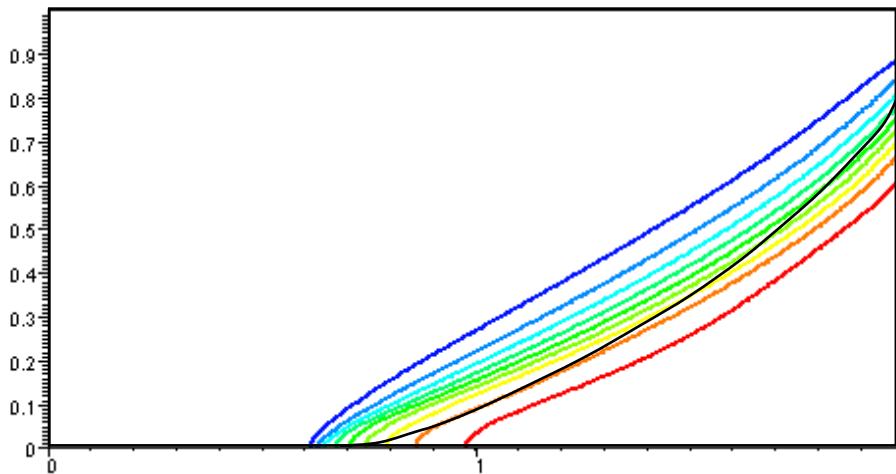
La figure 3.14 superpose les profils de l'interface abrupte (notre modèle) et du champ de concentration  $C(x,z)$  (le problème de Henry) aux temps longs, c'est-à-dire en régime quasi-permanent).

On observe que l'interface abrupte de notre modèle correspond assez bien à une courbe iso-concentration médiane ( $C = 0.5$  en adimensionnel). Cependant, le biseau salé sur le substratum imperméable n'a pas la même forme pour le modèle interface abrupte (absence d'inflexion).

Cette forme est modifiée dans le problème de Henry lorsqu'on tient compte de la dispersion hydrodynamique (en plus de la diffusion moléculaire) (Abarca et al., 2006). Or les résultats de la figure 3.15 montrent que les nouvelles iso-concentrations obtenues de cette façon ont une forme plus proche de notre modèle interface abrupte.



**Fig. 3.14** Comparaison entre la position de l'interface abrupte simulée par SWIM3D et la distribution normée de la concentration de sel du problème de Henry simulé avec FEFLOW. La transition entre les couleurs jaune et verte correspond à l'iso-concentration  $C=0.5$  (normalisée).



**Fig. 3.15** Comparaison entre la position de l'interface abrupte simulé par SWIM3D et la distribution normé de la concentration de sel du problème de Henry modifié (avec dispersion) simulé d'après Abarca (2006). Chaque courbe correspond à un pourcentage de sel de 10% (pour la ligne blue) à 90% (pour la ligne rouge).

### III - 7 CONCLUSIONS

Dans ce chapitre nous avons adopté l'approche d'interface abrupte à deux fluides non miscibles pour la modélisation de l'intrusion saline. Nous avons formulé les équations régissant le comportement de l'interface abrupte séparant l'eau douce et l'eau salée. Nous avons développé une méthode numérique, qui ne nécessite pas un suivi lagrangien d'interface ni un remaillage dynamique.

Notre méthode présente un avantage par rapport à l'approche avec diffusion de sel par le fait que seules les équations concernant l'écoulement d'eau douce, dans les zones saturée et non saturée, sont résolues. Dans cette approche, l'eau salée est considérée comme étant quasi-hydrostatique (vitesses quasi-nulles), mais cet état d'équilibre de l'eau salée peut évoluer en temps. La zone salée n'est donc immobile, elle varie en temps.

L'écoulement en zone non saturée, est décrit à l'aide de courbes caractéristiques de rétention  $\Theta(h)$  et de conductivité hydraulique  $K(h)$ , qui sont ré-interprétées comme des fonctions caractéristiques 'effectives' pour le système composé de l'eau douce, l'eau salée, et la zone non saturée. Nous avons testé une version continues des fonctions  $\Theta(h)$  et  $K(h)$  proposé par d'autre auteur. Cette version a présenté des problèmes d'anti-diffusion. Ensuite on a proposé des nouvelles fonctions présentant un Dirac au niveau de l'interface. Cette astuce numérique a résolu le problème de l'anti-diffusion.

Deux tests on été effectué pour comparé l'approche. Les tests effectués montrent que la technique proposée est capable de déterminer avec précision la position de l'interface eau douce/eau salée. La validation, en régime permanent, des résultats numériques avec ceux de la solution analytique de Glover est concluante. Une deuxième comparaison est effectuée avec les résultats numériques de la simulation du problème de Henry (1964) qui utilise l'approche diffusive. La comparaison montre qualitativement que l'interface modélise par notre approche est proche de l'iso surface  $C=0.5$ .

# **Chapitre IV    MODELISATION STOCHASTIQUE DE L'INTRUSION SALINE EN 2D PLAN**

**TABLE DES MATIERES DU CHAPITRE IV**

<b>Chapitre 4 Modélisation stochastique de l'intrusion saline en 2D plan</b>	<b>55</b>
--	-----------

<b>Résumé</b>	<b>57</b>
---------------	-----------

<b>Random Field Approach to Seawater Intrusion in Heterogeneous Coastal Aquifers: Unconditional Simulations and Statistical Analysis</b>	<b>58</b>
--	-----------

<b>1. Introduction and summary</b>	<b>58</b>
<b>2. Groundwater flow equations with seawater intrusion</b>	<b>58</b>
<b>3. Unconditional Random Aquifers (Single Replicates)</b>	<b>60</b>
<b>4. Numerical solution with the BIGFLOW code</b>	<b>60</b>
<b>5. Simulation results and statistical analysis of salt wedge</b>	<b>60</b>
5.1 Aquifer flow configuration and statistical inputs	60
5.2 Effect of heterogeneity level on mean salt wedge	61
5.3 Statistical analysis of salt wedge fluctuations (1000 x 1000 grid)	62
<b>6. Stochastic analysis of salt wedge via <math>\Phi</math>-transform</b>	<b>62</b>
6.1 Transformation of $Z_{\text{SALT}}$ into a potential $\Phi$	62
6.2 Statistics of transformed potential via spectral theory	66
6.3 Numerical moments of seawater of interface and comparisons	67
<b>7. Summary and conclusions</b>	<b>69</b>
<b>8. Acknowledgment</b>	<b>69</b>
<b>9. References</b>	<b>69</b>

<b>Uncertainty analyses of seawater intrusion : numerical and stochastic approaches</b>	<b>71</b>
---	-----------

<b>1. INTRODUCTION</b>	<b>71</b>
<b>2. PROBLEM FORMULATION AND NUMERICAL MODEL</b>	<b>71</b>
<b>3. CONTROL OF NUMERICAL ACCURACY AND ROBUSTNESS</b>	<b>72</b>
3.1 Continuation method for highly heterogeneous media	72
3.2 Numerical accuracy for high contrast simulations	74
3.3 Robustness of the linear and non-linear system solvers	74
<b>4. NUMERICAL RESULTS AND ANALYSES</b>	<b>75</b>
<b>5. CONCLUSIONS AND OUTLOOK</b>	<b>76</b>
<b>6. Acknowledgements</b>	<b>77</b>
<b>7. REFERENCES</b>	<b>77</b>

## Résumé

Ce chapitre est constitué de deux publications en anglais : un chapitre de livre (Albitar et Ababou, 2005) et un article de conférence (Albitar et Ababou, 2006). Dans ce chapitre on présente des résultats numériques et analytiques de modélisation stochastique de l'intrusion saline dans des domaines 2D plan hétérogènes jusqu'à fortement hétérogènes. L'objectif principale est de déduire une relation entre l'incertitude de la position de l'interface eau douce/eau salé et l'hétérogénéité du milieu poreux représenté à travers de la transmissivité hydraulique. Dans la première partie du chapitre l'accent est mis sur les équations mathématiques, la solution numérique et la solution analytique stochastique du problème. Tandis que dans la seconde partie, les méthodes numériques utilisées pour la modélisation de l'écoulement en milieu fortement hétérogène sont présentées. L'annexe D complète ce chapitre on pressentent la méthode spectrale, et les résultats numériques complets.

# Random Field Approach to Seawater Intrusion in Heterogeneous Coastal Aquifers: Unconditional Simulations and Statistical Analysis

**Ahmad Al-Bitar<sup>1</sup> and Rachid Ababou<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, Allée Camille Soula,  
31400 Toulouse, France.

## 1 Introduction and summary

Seawater intrusion in coastal aquifers is a growing concern in Mediterranean regions, due to over-population and over-exploitation of coastal groundwater resources. Under these circumstances, it is essential to model the extent of seawater intrusion and to locate the saltwater-freshwater interface taking into account heterogeneity and parameter uncertainty. There are different ways to couple salt transport and freshwater flow in groundwater models. We choose here the vertically integrated sharp interface approach, with two immiscible fluid regions (freshwater and seawater). We use this model to analyze the effects of aquifer variability on the saltwater wedge in plane view, based on large numerical simulations of 2D seawater intrusion in randomly heterogeneous unconfined aquifers.

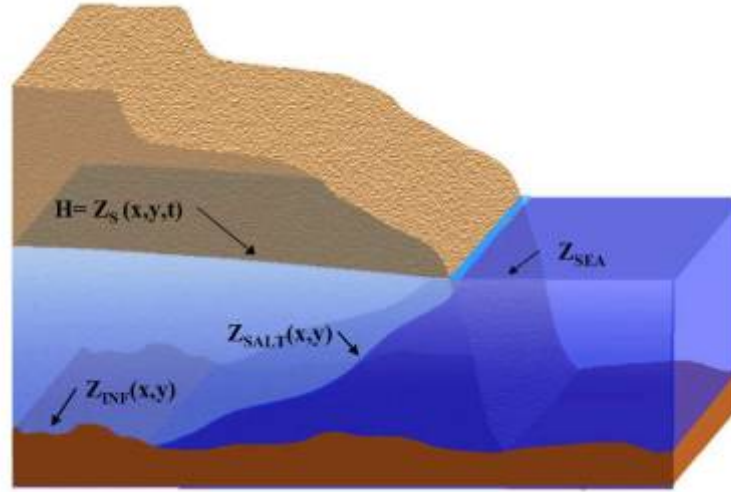
## 2 Groundwater flow equations with seawater intrusion

We consider an unconfined coastal aquifer with an impervious bedrock at  $z = Z_{\text{INF}}(x,y)$  and a fresh water table of elevation  $z = Z_s(x,y)$ . In addition, because we use a plane flow model, the vertically averaged freshwater hydraulic head  $H(x,y)$  coincides with the free surface elevation, i.e. :  $H(x,y) \approx Z_s(x,y)$ . In this 2D framework, all variables and parameters are spatially distributed in  $(x,y)$ . A schematic representation of the coastal aquifer and its salt wedge is shown in Fig. 1.

We assume that seawater and freshwater are separated by a sharp interface. More precisely, we rely on the Ghyben-Herzberg approximation(s), that is:

- the seawater and freshwater fluids are assumed immiscible (sharp interface);
- the subsurface seawater wedge is assumed quasi-hydrostatic;
- the freshwater is assumed vertically hydrostatic (negligible vertical velocities).





**Fig. 1** Schematic view of seawater intrusion (sea level  $Z_{SEA}$  shown at right) into a free surface aquifer (shown at left), with saltwater interface  $Z_{SALT}(x,y)$  and substratum  $Z_{INF}(x,y)$

Now, let  $Z_{SALT}(x,y)$  be the elevation of the salt/fresh water interface. Applying the hydrostatic assumptions and the pressure continuity condition at the interface, and modifying the Badon-Ghyben-Herzberg configuration to account for a finite outflow face of height  $\Delta Z$  located undersea, we obtain:

$$\rho_F g (H - Z_{SALT}) = \rho_S g (Z_{SEA} - Z_{SALT} - \Delta Z) + \rho_F g \Delta Z \quad (26)$$

This gives finally the desired closure relation:

$$Z_{SALT} = Z_{SEA} - \frac{(H - Z_{SEA})}{\varepsilon} - \Delta Z \quad (27)$$

In these equations,  $\rho_F$  is freshwater density,  $\rho_S$  is saltwater density, and  $\varepsilon$  is the saltwater-to-freshwater density contrast:

$$\varepsilon = \frac{\rho_S - \rho_F}{\rho_F} \approx 1/40 \quad (28)$$

Parameter  $\Delta Z$  is the vertical depth of the freshwater outflow face at the shoreline, assumed much smaller than aquifer thickness. It can be obtained from exact solution of seawater intrusion in a vertical slice  $(x,z)$  of a homogeneous confined aquifer, without depth-averaging. Here,  $\Delta Z$  is about 0.77 m, compared to 30 m aquifer thickness.

For freshwater flow, we use the Dupuit-Boussinesq plane flow approximation. The freshwater thickness is defined as:

$$\eta(x, y) = H(x, y) - Z_{inf}(x, y) \quad \text{or} \quad \eta(x, y) = H(x, y) - Z_{salt}(x, y) \quad (29)$$

depending on spatial location  $(x,y)$ , within the salt wedge or not. The freshwater transmissivity  $T(x,y)$  is then inferred from freshwater thickness  $\eta(x,y)$  as follows :

$$T(x, y) = K(x, y) \times \eta(x, y) \quad (30)$$

Note that  $T$  is spatially variable via  $K$  and  $Z_{INF}$ , and also, nonlinear via the unknown variables  $H$  and  $Z_{SALT}$  on which it depends. Finally, we obtain the following system of vertically integrated flow equations (steady state case):

1. Steady-state mass conservation (freshwater):

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = -\text{div}(\mathbf{Q}) \quad \text{where } \Theta \text{ is the water content} \quad (31)$$

2. Darcy's law (vertically integrated):

$$\mathbf{Q} = -T(H, Z_{SALT}, Z_{INF}, x, y) \text{grad}(H) \quad (32)$$

### 3. Freshwater transmissivity:

$$T = \begin{cases} K(x,y) \times (H - Z_{INF}(x,y)) & \text{if } Z_{SALT} < Z_{INF} \\ K(x,y) \times (H - Z_{SALT}(x,y)) & \text{if } Z_{SALT} \geq Z_{INF} \end{cases} \quad (33)$$

## 3 Unconditional Random Aquifers (Single Replicates)

In this paper, we choose to study uncertainty without regard for specific data. That is, we choose to simulate seawater intrusion in large unconditional single-replicates of the heterogeneous aquifer. We use the XIMUL code to generate isotropic log-normal random fields  $K(x,y)$  on 1 million node grids ( $1000^\circ \times 1000^\circ$ ).

The XIMUL code deals more generally with Bayesian estimation and conditional simulation of 1,2,3-D random functions of space or time [Ababou et al 1994]. The unconditional generator uses the Fourier Turning Band method based on a representation theorem of Matheron (1973): see [Tompson et al. 1989] and references therein.

## 4 Numerical solution with the BigFlow code

Numerical simulations of seawater intrusion are carried out using the BigFlow code BF 2000 [Ababou and Trégarot 2002]. It solves a generalized model equation for flow in heterogeneous, anisotropic, partially saturated media. It can efficiently follow multiple interacting free surfaces in 3D, and it can represent “open” or “macroporous” media [Trégarot 2000]. A vertically integrated 2D flow module is also available, including Boussinesq-Dupuit aquifer flows, free surface hydraulics based on kinematic-diffusive wave, Darcy-Forchheimer flow in rough fractures [Spiller 2004], and the seawater intrusion module SWIM2D used here.

The BF 2000 code is based on implicit 3D finite volume formulation of flux divergence equations in conservative form (mixed form). It solves fully coupled transient and steady flow problems, using a single infinite time step for steady state. It uses Preconditioned Conjugate Gradients for matrix solution, and modified Picard iterations for nonlinear solution. The matrix-vector data structure is very sparse. For more details on the numerics, see [Ababou et al 1992; Ababou and Bagtzoglou 1993; Ababou 1996].

## 5 Simulation results and statistical analysis of salt wedge

### 5.1 Aquifer flow configuration and statistical inputs

We consider steady flow in a heterogeneous unconfined coastal aquifer in a square domain ( $1 \text{ km} \times 1 \text{ km}$ ). The mean freshwater flow is directed along the  $x$  axis. We apply constant head boundary conditions (Dirichlet) on boundaries orthogonal to mean flow:  $Z_{SEA}=30 \text{ m}$  (seawater level) and  $H_1 = 31 \text{ m}$  (freshwater inland). The hydraulic gradient, directed along ( $x$ ), is  $0.001 \text{ m/m}$ , a typical value for regional flow in coastal regions. Lateral boundaries orthogonal to seashore are assumed impervious. Other statistical-geometric parameters concerning the planar grid and the random log-permeability field  $\ln K(x,y)$  are shown in Table 1.

**Table 1** Summary of statistical parameters for two sets of simulations (small and large)

Parameters	Set 1	Set 2
ni (number of nodes)	$300 \times 300$	$1000 \times 1000$
$\Delta x_i$ (discretization cell size) (m)	10/3	1
Li (domain length) (m)	1000	1000
$\lambda$ (lnk- correlation scale) (m)	100/3	10
$\Delta x_i / \lambda$ (grid resolution)	1/10	1/10
Li / $\lambda$ (sampling number)	30	100
$\Delta H / L_x$ (mean gradient)	1/1000	1/1000
$\sigma$ (standard deviation of lnK)	1, $\sqrt{2}$ , 1.6, 2, ln(10)	1, $\sqrt{2}$ , 1.6, 2, ln(10)

A statistically isotropic log-normal random field  $K(x,y)$  was generated on a one million node grid ( $1000 \times 1000$  cells), with either smooth (gaussian) or noisy (exponential) covariance structure. A good fit was obtained when comparing theoretical vs computed spatial autocorrelation function of  $\ln K(x,y)$  for the gaussian covariance with  $\sigma_{\ln K} = 1$  on a  $1000 \times 1000$  grid. Smaller  $300 \times 300$  fields were then extracted from the center of the domain, and single replicate simulations of seawater intrusion were conducted, with variability ranging from  $\sigma_{\ln K} = 1$  to  $\ln 10$ .

In order to increase numerical accuracy, we used an iterative continuation method (or homotopy method) with respect to the  $\sigma$  parameter, where  $\sigma$  is the standard deviation of  $\ln K$  (degree of heterogeneity). Thus, the output of a heterogeneous problem is used as initial condition for simulating a “more heterogeneous” problem. This procedure adds an external loop to the flow solver. Mass balance errors, in terms of net discharge rate normalized by global outflow rate, did not exceed about 1%, for all simulations presented here.

## 5.2 Effect of heterogeneity level on mean salt wedge

Fig. 2 and Fig. 3 display perspective views of simulated seawater intrusion for a highly variable permeability ( $\sigma_{\ln K} = \ln 10 \approx 2.30$ ). Two surfaces are displayed in each figure:  $Z_{\text{SALT}}(x,y)$ , the salt/fresh interface level (mapped with color-coded  $\log K$  values), and  $Z_s(x,y)$ , the freshwater piezometric surface (or hydraulic head), also mapped with the same color-coded or grey-scale  $\log K$  values.

On Fig. 2, one can clearly observe the sharp local gradients of the saltwater interface occurring in low permeability zones, which act as barriers to seawater (it should be kept in mind, however, that  $K(x,y)$  is the depth-averaged permeability).

Fig. 4 depicts the effect of heterogeneity level on the mean penetration of the salt wedge, for a  $300 \times 300$  grid. The mean  $Z_{\text{SALT}}(x)$  profile is plotted versus distance from sea ( $x$ ), after averaging  $Z_{\text{SALT}}(x,y)$  along the shorewise direction ( $y$ ). The three profiles correspond to:  $\sigma_{\ln K} = 0$  (homogeneous),  $\sigma_{\ln K} = 1$  (moderate heterogeneity) and  $\sigma_{\ln K} = \ln 10$  (high heterogeneity). As the level of variability  $\sigma_{\ln K}$  increases, the mean elevation  $Z_{\text{SALT}}(x)$  increases and the mean salt wedge penetrates farther inland. The extra penetration of the mean wedge due to heterogeneity is about 200 m, for the most heterogeneous case.

A similar result (not shown here) was obtained for the larger  $1000 \times 1000$  grid with heterogeneity levels  $\sigma_{\ln K} = 0, 1.0, \sqrt{2}, 1.6$ , and  $\ln 10$ . It confirms the monotonic increase of the mean penetration length of the salt wedge as  $\sigma_{\ln K}$  increases, compared to a homogeneous aquifer with geometric mean permeability.

### 5.3 Statistical analysis of salt wedge fluctuations (1000 × 1000 grid)

As a first step towards uncertainty analysis (next section), let us develop further the statistical analysis of the simulated salt wedge, based on single replicate unconditional simulations obtained on the largest grid (1000 × 1000 cells).

The salt wedge is characterized by the shape of the saltwater interface elevation  $Z_{\text{SALT}}(x,y)$  and its horizontal extension inland. We consider  $Z_{\text{SALT}}(x,y)$  as a random field and we analyze it statistically. We focus in particular on the first and second order moments of  $Z_{\text{SALT}}(x,y)$ , including its mean and its standard deviation. This analysis is applied to the 1000x1000 grid, with large variability ( $\sigma_{\ln K} = \ln 10$ ).

Given the symmetries of the problem and the statistical stationarity of  $K(x,y)$ , we expect the surface  $Z_{\text{SALT}}(x,y)$  to be stationary (statistically homogenous) along the  $y$  direction parallel to the seashore. However, it will not be stationary along the  $x$  direction parallel to flow (transverse to seashore).

Indeed, Fig. 5 shows 100 transects  $Z_{\text{SALT}}(x,y_n)$  along with the average profile, all plotted as functions of the  $x$ -coordinate (perpendicular to sea shore). The profiles  $Z_{\text{SALT}}(x)$  are clearly non-stationary.

## 6 Stochastic analysis of salt wedge via $\Phi$ -transform

It is clear from both Fig. 4 (mean  $Z_{\text{SALT}}$ ) and Fig. 5 (random  $Z_{\text{SALT}}$ ) that the interface elevation  $Z_{\text{SALT}}(x,y)$  follows a nonlinear trend along  $x$  (for fixed  $y$ ) and cannot be a stationary random function of  $x$ . This observation has two consequences:

1. Given a single replicate of the coastal aquifer in  $(x,y)$ , we can only sample in the shorewise direction ( $y$ ) to produce a statistical description of the salt wedge.
2. For theoretical purposes, we may seek a convenient transformation  $Z_{\text{SALT}} \rightarrow \Phi$  to obtain an approximate stationary field  $\Phi$  from the non-stationary field  $Z_{\text{SALT}}$ .

### 6.1 Transformation of $Z_{\text{SALT}}$ into a potential $\Phi$

Following this idea, consider first the analytical solution of the homogenous problem ( $\sigma = 0$ ) using the Badon-Ghyben-Herzberg assumption, modified to include a submarine outflow face of height  $\Delta Z$  at the seashore :

$$Z_{\text{SALT}}(x) = Z_{\text{SEA}} - \left( \frac{\varepsilon \Delta Z}{\varepsilon + 1} \right) - \Delta Z - \sqrt{\frac{x}{\varepsilon L_X} \frac{H_1^2 - Z_{\text{SEA}}^2 (\varepsilon + 1)}{\varepsilon (\varepsilon + 1)} + \left( \frac{\varepsilon \Delta Z}{\varepsilon + 1} \right)^2} \quad (34)$$

Equation (34) holds for  $0 \leq x \leq L_{\text{SALT}}$ , where  $x=L_{\text{SALT}}$  is the intersection of the saltwater interface with the substratum. Thus, if the bedrock is at  $z = 0$ , the value of  $L_{\text{SALT}}$  is defined by  $Z_{\text{SALT}}(x) = 0$ . Other variables in equation (34) are defined below:

- $L_X$  is the domain size in the  $x$ -direction, between the two fixed head boundaries  $H=H_0$  (sea at left) and  $H=H_1$  (freshwater at right);
- $Z_{\text{SEA}} = H_0$  is the elevation and depth of the sea level above the substratum, at the sea boundary  $x=0$ ;
- $H_1$  is the depth of the freshwater level above the substratum at the inland boundary  $x=L_X$ ;
- $Z_{\text{SALT}}$  is the elevation of saltwater/freshwater interface above the substratum;
- $L_{\text{SALT}}$  is the  $x$ -wise penetration length of the salt wedge inland, on the bedrock;
- $\Delta Z$  is the vertical length of the submarine freshwater outflow face into the sea.

The term  $(\varepsilon \Delta Z)/(\varepsilon+1)$  can sometimes be neglected in equation (9); we have here:

$$(\varepsilon \Delta Z)/(\varepsilon+1) = 0.018 \text{ m},$$

which is indeed small compared to  $Z_{SEA} = 30 \text{ m}$  and to  $\Delta H = H_1 - Z_{SEA} = 1 \text{ m}$ .

Also, to simplify the above expression  $Z_{salt}(x)$ , we define a new parameter  $h_0$  :

$$h_0 = \sqrt{\frac{H_1^2 - Z_{SEA}^2 (\varepsilon + 1)}{\varepsilon \cdot (\varepsilon + 1)}} \quad (35)$$

This parameter,  $h_0$ , is a length scale on the same order as the thickness of the freshwater lens imposed at the inland boundary (upstream). The solution of the homogenous problem  $\sigma = 0$  can now be expressed as:

$$Z_{SEA} - \delta Z - Z_{SALT}(x) \approx \frac{h_0}{\sqrt{\varepsilon}} \cdot \sqrt{\frac{x}{L_X}} \quad (36)$$

This simple analytical expression (36) shows that there exists, for the homogeneous case, a quadratic transform which makes the saltwater profile exactly linear in  $x$ . For the heterogeneous case, with random field permeability, this suggests applying the same quadratic transform to the nonlinear random function  $Z_{SALT}(x,y)$ . The transformed field is a new random “potential” field  $\Phi_{SALT}(x,y)$  with:

$$\Phi_{SALT} = (Z_{SEA} - \delta Z - Z_{SALT})^2 \quad (37)$$

We may expect that the random  $\Phi_{SALT}(x,y)$  has a roughly linear trend. Furthermore, it is possible to derive analytically the mean and variance of  $Z_{SALT}$  from the moments of the random field  $\Phi_{SALT}(x,y)$ . Let us first normalize  $Z_{SALT}$  and  $\Phi_{SALT}$  by  $Z_{SEA}$  as follows:  $Z = (Z_{SALT} - \delta Z)/Z_{SEA}$ ;  $\phi = \Phi_{SALT}/Z_{SEA}$ . The  $\Phi$ -transform is now:

$$\phi(x,y) = (1 - Z(x,y))^2 \quad (38)$$

with  $\phi = 0$  (exactly) on the sea boundary  $x = 0$ , and  $\phi = 1$  at some fixed distance  $L_1$ , the characteristic length of penetration of the salt wedge. The latter is given, to order  $O(\sigma)$ , by the analytical solution for a homogeneous aquifer:

$$L_1 = L_{SALT}(\sigma) \approx L_{SALT}(0) \times (1 + O(\sigma)) \quad (39)$$

Thus, we may write the (approximate) boundary condition of the random case as:

$$x = 0 : \phi = 0; \quad x = L_1 : \phi \approx 1 + O(\sigma) \quad (40)$$

The main idea, here, is that we prefer to solve for the  $\Phi$ -field because it is more easily amenable to statistical analysis than the  $Z$ -field (more on this below). With this goal in mind, let us define the random fluctuations of  $\phi$  and  $Z$ :

$$\varphi(x,y) = \phi(x,y) - \bar{\phi}(x) \quad \text{and} \quad z(x,y) = Z(x,y) - \bar{Z}(x) \quad (41)$$

where the mean potential is given by:  $\bar{\phi}(x) = \langle (1 - Z)^2 \rangle$ .

The brackets  $\langle \bullet \rangle$  represent either the shorewise spatial average (spatial mean of a single replicate along direction “y”), or the mathematical expectation  $E(\bullet)$  over an ensemble of replicates : the two are equivalent if ergodicity is assumed.

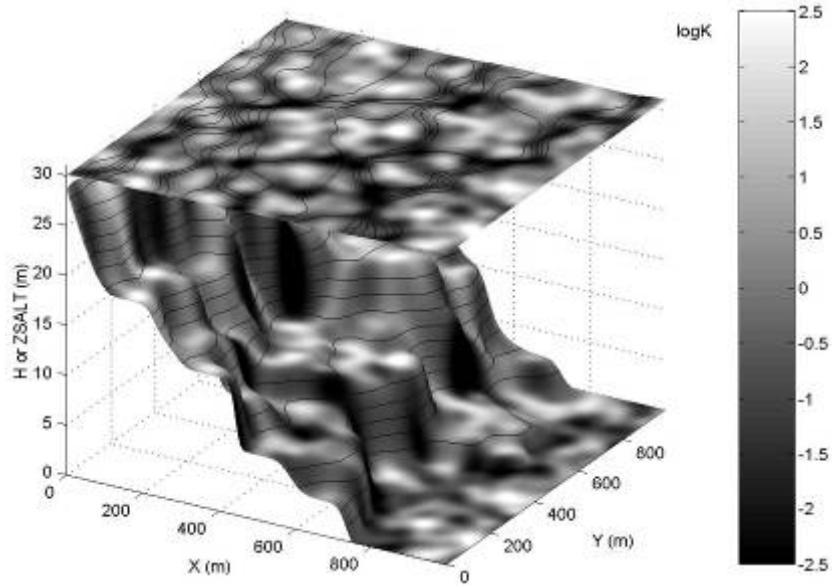
Now, substituting the random fluctuations in equation (38) and taking averages, we obtain:

$$\bar{\phi} = (1 - \bar{Z})^2 + \langle z^2 \rangle \quad \text{and} \quad \sigma_Z^2 = \bar{\phi} - (1 - \bar{Z})^2 \quad (42)$$

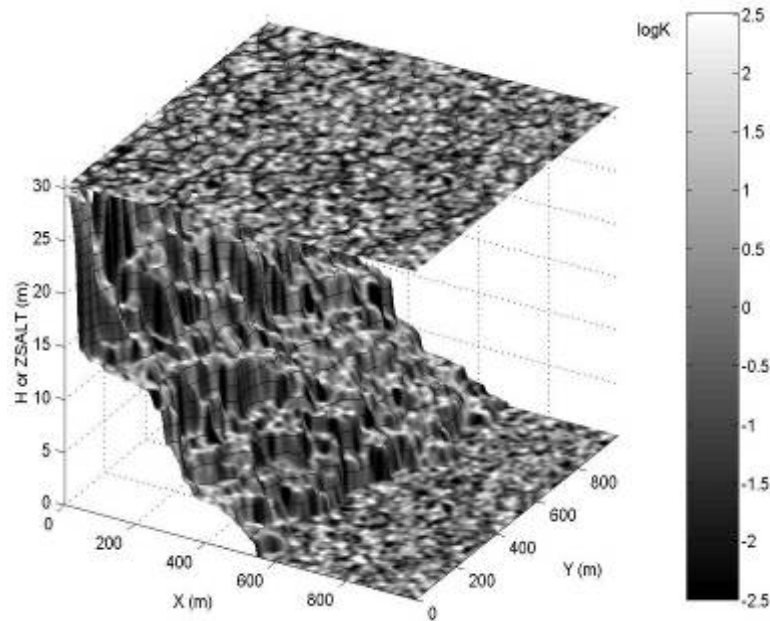
where the mean  $\langle Z \rangle$  remains to be determined. On the other hand, from equation (38) :

$$Z = 1 - \phi^{1/2} \quad (\text{for } 0 < x < L_1 \text{ and } 1 > Z > 0). \quad (43)$$

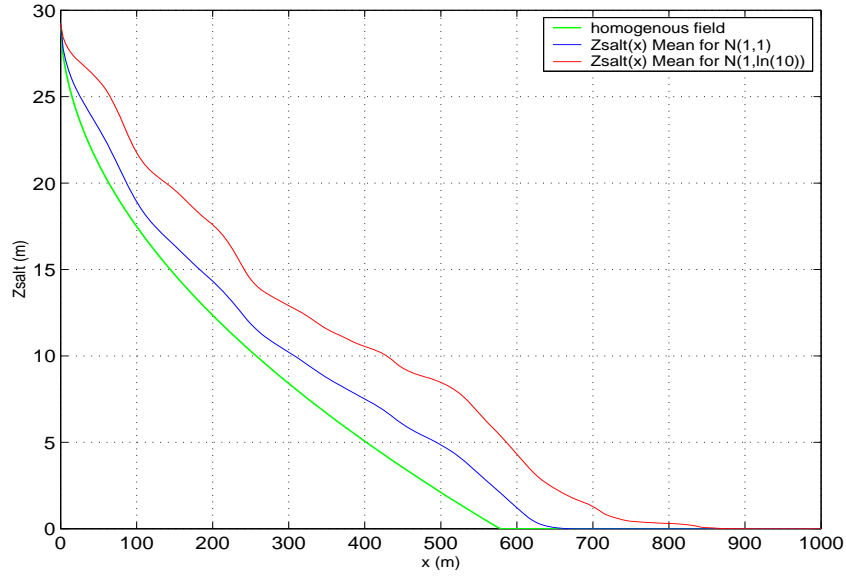
$$\bar{Z} = 1 - \bar{\phi}^{1/2} \langle (1 + \kappa)^{1/2} \rangle \quad \text{with} \quad \kappa = \frac{\varphi}{\phi} < 1 \quad (44)$$



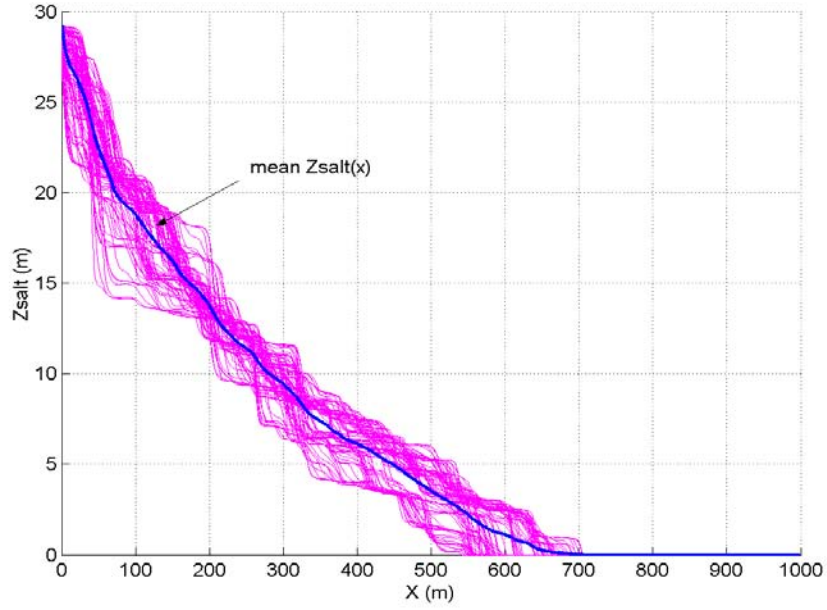
**Fig. 2** Perspective view of  $Z_{SALT}(x,y)$ ,  $H(x,y)$ , and  $\log K(x,y)$  for a gauss-shaped isotropic covariance with  $\sigma = \ln 10$  and  $L/\lambda = 30$ . Simulation grid:  $300 \times 300$



**Fig. 3** Perspective view of  $Z_{SALT}(x,y)$ ,  $H(x,y)$ , and  $\log K(x,y)$  for a gauss-shaped isotropic covariance with  $\sigma = \ln 10$  and  $L/\lambda = 100$ . Simulation grid:  $1000 \times 1000$



**Fig. 4** Mean  $Z_{\text{SALT}}(x)$  profile transverse to seashore for a  $300 \times 300$  grid : analytical solution for  $\sigma = 0$  and computed mean profiles for  $\sigma = 1.0$  to  $\ln 10$  ( $Z_{\text{SALT}}$  increases with  $\sigma$ )



**Fig. 5** Transverse profiles of  $Z_{\text{SALT}}(x)$  (the seashore is at left) : comparison of mean  $Z_{\text{SALT}}(x)$  (shorewise average) with 100 distinct transects of  $Z_{\text{SALT}}(x, y_n)$  sampled at equally spaced shorewise positions ( $y_n$ ). Simulation grid :  $1000 \times 1000$ . Heterogeneity:  $\sigma = \ln 10$

Using a Taylor expansion cut off to 2nd order, yields:

$$\bar{Z} \approx 1 - \bar{\phi}^{1/2} \left( 1 - \frac{1}{8} \tau^2 + O(\langle \kappa^3 \rangle) \right); \quad \tau = \frac{\sigma_\phi}{\langle \phi \rangle}; \quad \kappa = \frac{\phi}{\langle \phi \rangle} \quad (45)$$

We finally substitute Eq. (45) into Eq. (42) to calculate the standard deviation of  $Z$ . Neglecting  $\tau^4/64$  and other “higher order terms” (“h.o.t.”), we obtain:

$$\sigma_Z \approx \frac{1}{2} \frac{\sigma_\phi}{\sqrt{\phi}} + h.o.t. \quad (46)$$

This analytical expression can be used to predict  $\sigma_Z$  using either numerical estimates or theoretical spectral estimates of  $\phi$ -statistics : the two procedures yield similar results (see comments about Fig. 6 further below).

## 6.2 Statistics of transformed potential via spectral theory

We now need to determine the statistical moments of  $\Phi$ , e.g. mean and variance. Two approaches are possible concerning the transformed potential  $\Phi$ :

- a) Empirical evaluation of  $\Phi$ -moments (sampling numerical simulation);
- b) Theoretical evaluation of  $\Phi$ -moments (analytical spectral perturbation).

Empirically, the first two lines in Table 2 show some of the numerically computed moments of  $\Phi_{SALT}$ , assuming a linear trend  $\langle \Phi \rangle$ , and stationary fluctuations  $\phi(x,y)$  around the linear trend:

$$\langle \Phi(x, y) \rangle = \bar{\Phi}(x) \approx ax \quad \phi(x, y) \approx \Phi(x, y) - ax \quad (47)$$

$$\sigma_\phi = \langle \phi(x)^2 \rangle^{1/2} \approx \text{constant} \quad (48)$$

Note: These relations hold only in a subdomain comprised between the sea boundary  $x = 0$  (where  $\phi = 0$ ) and the tip of the salt wedge  $x \approx L_1 + O(\sigma)$  (where  $\phi \approx 1 + O(\sigma)$ ).

On the other hand, we demonstrate that the  $\Phi$ -equation in the salt wedge zone is a stochastic PDE, analogous to the Boussinesq equation for vertically averaged groundwater flow with random  $K(x,y)$ . Indeed, from eqs.(30), (31), (32), we have:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( -K(x_1, x_2) (H - Z_{SALT}) \frac{\partial H}{\partial x_i} \right) \quad (i=1,2) \quad (49)$$

The freshwater head  $H$  is given by the Ghyben-Herzberg relation Eq.(2.68):

$$H = (1 + \varepsilon) Z_{SEA} - \varepsilon \Delta Z - \varepsilon Z_{SALT} \quad (50)$$

Substituting  $H$  in Eq.(49), and using the  $\Phi$ -transform, we obtain:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( -K(x_1, x_2) \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) = 0 \quad (i=1,2) \quad (51)$$

We observe that this  $\phi$ -equation is equivalent to a stochastic groundwater flow equation with 2D random field transmissivity in a confined aquifer (cf. “infinite domain” spectral perturbation solutions by [Mizell et al. 1982]). Thus,  $\sigma_\phi$  can be evaluated from the spectral solution of Eq.(51), at least far enough from the sea and the saltwedge tip. The “theoretical” standard deviation of  $\phi$  is deduced from the Mizell et al (1982) solution, for a “modified Wittle” correlation structure:

$$(\sigma_\phi)_{THEORY} \approx c \sigma_{\ln K} \lambda_{\ln K} J_x \approx c \sigma_{\ln K} \lambda_{\ln K} a \quad (52)$$

where  $J_x$  is the mean  $\Phi$ -gradient denoted “ $a$ ” in this paper. The coefficient “ $c$ ” is a dimensionless constant of order 0(1) [Mizell et al 1982]. For the problem at hand, the value of “ $c$ ” can be obtained by matching numerical and theoretical “ $\sigma_\phi$ ” at low levels of heterogeneity ( $\sigma_{\ln K} \leq 1$ ). This procedure gives:



$$c \approx 1.10 \quad (53)$$

Similarly, the relevant value of the mean  $\Phi$ -gradient,  $a = \langle d\Phi/dx \rangle$ , can be obtained from the exact analytical solution  $\Phi(x)$  in a homogeneous aquifer, which corresponds to the asymptotic case  $\sigma_{\ln K} \rightarrow 0$ . Thus, asymptotically:

$$\sigma \rightarrow 0 : (a)_{THEORY} = a_0 + O(\sigma) = \frac{h_0^2}{\varepsilon L_x} + O(\sigma) \quad (54)$$

**Table 2.** Empirical and theoretical moments of the transformed potential  $\Phi_{SALT}(x,y)$ .

$\sigma_{\ln K}$	0	1	1.60	2.30
$\hat{a}_{NUM} = \langle d\Phi/dx \rangle$	$a = 1.54$	$\hat{a} \approx 1.54$	$\hat{a} \approx 1.40$	$\hat{a} \approx 1.33$
$\hat{\sigma}_{\Phi NUM}$	$\sigma_{\Phi} = 0$	$\hat{\sigma}_{\Phi} \approx 17$	$\hat{\sigma}_{\Phi} \approx 27$	$\hat{\sigma}_{\Phi} \approx 42$
$\hat{\sigma}_{\Phi THEORY}$	$\sigma_{\Phi} = 0$	$\sigma_{\Phi} \approx 17$	$\sigma_{\Phi} \approx 27.2$	$\sigma_{\Phi} \approx 39.1$

To check whether “a” is nearly constant and close to its predicted value “a<sub>0</sub>”, consider the results summarized in Table 2. We conclude that the theoretical prediction of  $\sigma_{\Phi}$  given by equation (52) with  $a \approx a_0$  is robust.

Finally - after some manipulations involving statistics from the Z- $\Phi$  transform (Eqs.(45),(46)) and the spectral solution for  $\sigma_{\Phi}$  - one obtains, to first order:

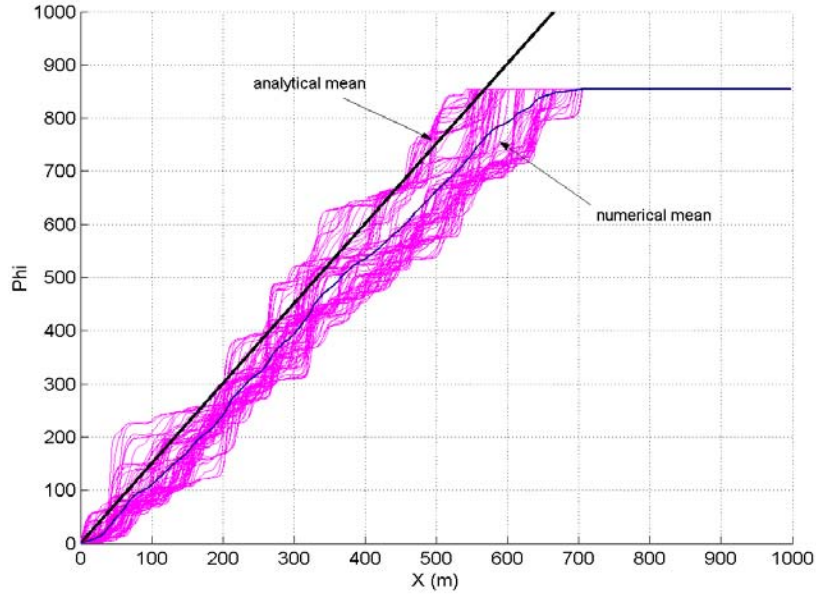
$$(a): \sigma_{Z_{SALT}}(x) \approx \frac{c}{2} \sigma_{\ln K} \lambda_{\ln K} \sqrt{\frac{a}{x}} \text{ or (b): } \sigma_{Z_{SALT}}(x) \approx \frac{c}{2} \sigma_{\ln K} \lambda_{\ln K} \left| \frac{\partial \bar{Z}}{\partial x} \right| \quad (55)$$

Both versions of this equation require mean gradient information: the first equation (a) requires knowledge of the (stationary) mean  $\phi$ -gradient “a”, while the second version (b) requires knowledge of the (non-stationary) mean interface elevation gradient.

### 6.3 Numerical moments of seawater of interface and comparisons

Fig. 6 shows 100 superimposed transects of the “potential”  $\Phi_{SALT}(x,y_n)$ , sampled at equally spaced shorewise locations “y<sub>n</sub>”, and plotted versus (x), for  $\sigma = \ln 10$ . The figure also shows the analytical profile  $\Phi_{SALT}(x)$  for a homogeneous aquifer ( $\sigma = 0$ ), as well as the numerical average of  $\Phi_{SALT}(x,y)$ . The fluctuations of  $\Phi_{SALT}(x,y)$  around its mean trend were also plotted as transects (not shown here). These numerical plots indicate the level of fluctuation of the salt interface in terms of the transformed field  $\Phi_{SALT}$ . They also confirm the quasi-linear trend of  $\Phi_{SALT}$ .

We computed the fluctuations of  $Z_{SALT}$  around its nonlinear mean trend, and we estimated  $\sigma_Z$  by sampling  $Z_{SALT}$  parallel to the seashore and plotting the resulting moment  $\sigma_Z$  as a function of distance (x) from the sea. One result is shown in Fig. 7 for large heterogeneity ( $\sigma = \ln 10$ ). The standard deviation of  $Z_{SALT}$  seems approximately stationary far enough from the seashore ( $x = 0$ ) and far enough from the salt wedge tip ( $x \approx 700$  m). In the stationary region of Fig. 7, we find  $\sigma_{Z_{SALT}} \approx 1.3$  m. The 95% confidence band of the salt interface is several meters, which represents a rather significant fraction of the total aquifer thickness of 30 m.

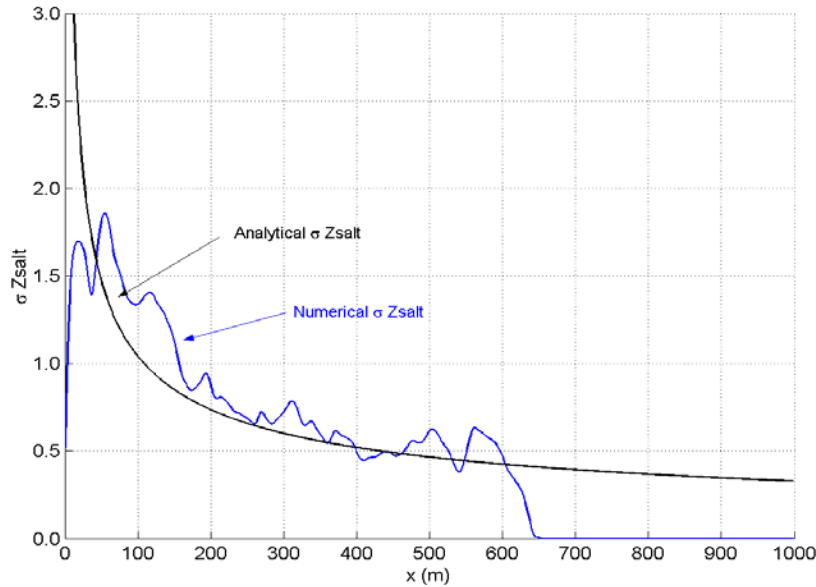


**Fig. 6** One hundred transects of  $\Phi_{\text{SALT}}$  (transformed from  $Z_{\text{SALT}}$ ); “analytical mean” curve  $\Phi_{\text{SALT}}$  (homogeneous aquifer); and “numerical mean” curve  $\Phi_{\text{SALT}}$  (mean of  $\Phi_{\text{SALT}}$  sampled shorewise along “y”). The sea shore is at left. Grid: 1000x1000. Heterogeneity:  $\sigma = \ln(10)$

The results appear different for lesser heterogeneity: see Fig. 8 for  $\sigma = 1.60$ , and note that similar results were obtained for  $\sigma$  in the range  $0 \leq \sigma \leq 2.0$ . In all these cases,  $\sigma_{Z_{\text{SALT}}}(x)$  is non-stationary with respect to  $(x)$  and decreases with  $(x)$ , as predicted by the theoretical  $\Phi$ -transform analysis. This can be seen by comparing the “numerical” and “analytical” (Eq.(55).a)  $\sigma_{Z_{\text{SALT}}}(x)$  curves in Fig. 8.



**Fig. 7** Standard deviation of  $Z_{\text{SALT}}$  vs. distance  $(x)$  from seashore (sea located at left), obtained by sampling  $Z_{\text{SALT}}$  fluctuations in the shorewise direction  $(y)$ . The global value of  $\sigma_Z$  appears to be about  $\sigma_Z \approx 1.3$  m. Grid: 1000x1000 cells. Heterogeneity:  $\sigma_{\ln K} = \ln 10 = 2.30$



**Fig. 8** Numerical and theoretical  $\sigma_{Z_{SALT}}$  vs distance from sea ( $x$ ) for  $\sigma_{\ln K} = 1.60$

## 7 Summary and conclusions

We have presented numerical experiments of seawater intrusion based on unconditional simulations of random permeability fields  $K(x,y)$ , where  $K(x,y)$  represents a depth-averaged permeability. The effects of planar heterogeneity on the extent and shape of the salt wedge were discussed, and we presented a statistical study of interface elevation  $Z_{SALT}(x,y)$  on a 1 million node grid (single replicates). The statistic ( $\sigma_{Z_{SALT}}$ ) can be viewed as the root-mean-square vertical uncertainty of the seawater interface due to heterogeneity. It is found to be more or less proportional to the mean gradient of  $Z_{SALT}$ , at least for low and moderate variability, which validates our perturbation theory. However, for higher variability, the observed standard deviation of  $Z_{SALT}$  tends to a constant value more or less independent of  $x$ , which is not quite reproduced by the same perturbation theory. Overall, our results indicate that  $\sigma_{Z_{SALT}}$  can be typically on the order of several meters.

## 8 Acknowledgment

This study is part of the european project SWIMED on coastal aquifer management, funded by the European Commission (Sustainable Water Management In MEDiterranean coastal aquifers): <http://www.crs4.it/EIS/SWIMED>

## 9 References

- Ababou R (1996) Random Porous Media Flow on Large 3D Grids: Numerics, Performance, and Application to Homogenization, Chap.1, pp.1-25. In: IMA Vol 79 Mathematics and its Applications: Environmental Studies (Math. Comput. Statist. Anal.). Wheeler MF (ed.), Springer, NY, 410 pp.
- Ababou R, Bagtzoglou AC (1993) BIGFLOW: a Numerical Code for Simulating Flow in Variably Saturated, Heterogeneous Geologic Media Theory and User's Manual Ver.1.1. NUREG/CR-6028, US NRC Report, Washington DC.

- Ababou R, Bagtzoglou AC, Wood EF (1994) On the Condition Number of Covariance Matrices Arising in Kriging, Estimation & Simulation of Random Fields. *Math.Geol.*26(1), pp. 99-133, 1994.
- Ababou R, Trégarot G (2002) Coupled Modeling of Partially Saturated Flows : Macro-Porous Media, Interfaces, and Variability. *Proc. CMWR 02, Comput Meth Water Resour*, 23-28 June 2002, Delft, The Netherlands, Elsevier, 8 pp.
- Ababou R, Sagar B, Wittmeyer G (1992) Testing Procedures for Spatially Distributed Flow Models. *Advances in Water Resources*, Vol.15, pp. 181-198, 1992.
- Matheron G. (1973) The Intrinsic Random Functions & Applications. *Adv.Appl.Prob.*, 5, 439-468
- Mizell SA, Gutjahr AL, Gelhar LW (1982) Stochastic Analysis of Spatial Variability in Two-Dimensional Steady Groundwater Flow Assuming Stationary and Nonstationary Heads. *Water Resour Res* 18(4) 1053-1067.
- Spiller M (2004) Physical and Numerical Experiments of Flow and Transport in Heterogeneous Fractured Media : Single Fracture Flow at High Reynolds and Reactive Particle Transport. PhD thesis, Aachen Univ. (Germany) & Institut Nat. Polytech. Toulouse (France), October 2004.
- Tompson AFB, Ababou R, Gelhar LW (1989) Implementation of the Three-Dimensional Turning Bands Random Field Generator. *Water Resour. Res.*, 25(10), 2227-2243.
- Trégarot G (2000) Modélisation Couplée des Ecoulements à Saturation Variable avec Hétérogénéités, Forçages, et Interfaces Hydrologiques. PhD thesis, Institut Nat. Polytech. Toulouse, May 2000.

**A. AL-BITAR & R. ABABOU**

Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT),  
 Allée du Professeur Camille Soula, 31400 Toulouse, France  
 e-mail: [ababou@imft.fr](mailto:ababou@imft.fr)

**Abstract** We consider immiscible saltwater-freshwater flow in heterogeneous coastal aquifers subject to seawater intrusion (sharp interface approach). We focus on the numerical modelling of the saltwater wedge, taking into account the variability and uncertainty due to highly heterogeneous random permeabilities. In this work, we focus on plane flow problems, with vertically integrated permeabilities, without hydrologic sink/source terms. We use a continuation method to obtain solutions for highly variable aquifers. The long term goal is to analyse the resulting uncertainty of the salt wedge penetration inland by various methods, such as spatial sampling; Monte-Carlo simulation; analytical perturbation methods. In this paper, we present statistical results (moments) obtained by spatial sampling of large single replicate numerical simulations based on the statistical homogeneity of the salt wedge in the seashore direction. The variables of interest are the random interface elevation ( $Z_{\text{salt}}(x,y)$ ), and the penetration length of the salt wedge toe ( $X_{\text{salt}}(x,y)$ ).

**Key words** Seawater intrusion; saltwater; coastal aquifers; porous media; random media; uncertainty; hydrogeology; numerical modelling; perturbation methods; upscaling.

**1 INTRODUCTION**

Seawater intrusion is a well known problem occurring in coastal aquifers. This phenomenon can take the form of a seawater wedge extending inland below freshwater. Here we focus on the effects of permeability heterogeneity on the extent of the seawater wedge in a phreatic coastal aquifer. Seawater intrusion is analysed using 2D plane flow Dupuit-Boussinesq approximation, combined to a sharp interface approach (Ghyben-Herzberg). Aquifer heterogeneity is represented via a 2D random field permeability (vertically integrated). The simulations are conducted for mildly to highly heterogeneous random fields, with natural log-permeability standard deviation ( $\sigma_{\ln K}$ ) ranging from 1.0 to 4.0. This paper focuses on the need for numerical accuracy in the case of highly heterogeneous aquifers. An optimized continuation method for modelling flow in highly heterogeneous domains is introduced and implemented in a Graphical User Interface (GUI) environment. While the domain geometry is simple, the main computational challenge is to solve the seawater intrusion problem on large numerical grids, with both nonlinear and highly variable coefficients. The numerical results are then analysed in terms of spatial statistics, such as the standard deviation of the seawater interface elevation versus distance from the seashore ( $\sigma_{Z_{\text{SALT}}(x)}$ ).

**2 PROBLEM FORMULATION AND NUMERICAL MODEL**

Seawater intrusion is modeled in the framework of the sharp interface approach, while still retaining the essential feature of aquifer variability in the 2D plane. Our approach assumes that seawater and freshwater are immiscible fluids, and relies on pressure equilibrium relations (Ghyben-Herzberg) to close the resulting system of equations. In this 2D

framework, all variables and parameters are spatially distributed in  $(x,y)$ .

Applying the hydrostatic assumptions and the pressure continuity condition at the interface, and modifying the Badon-Ghyben-Herzberg configuration to account for a finite outflow face of height  $\Delta Z$  located undersea, we obtain:

$$\rho_F g (H - Z_{SALT}) = \rho_S g (Z_{SEA} - Z_{SALT} - \Delta Z) + \rho_F g \Delta Z \quad (1)$$

where  $H$  is the total freshwater hydraulic head (m),  $Z_{SALT}$  is the salt/freshwater interface level (m),  $g$  is the gravitational acceleration ( $\text{m s}^{-2}$ ),  $\rho_F$  is the freshwater density ( $\text{kg m}^{-3}$ ),  $\rho_S$  is the saltwater density ( $\text{kg m}^{-3}$ ), and  $\Delta Z$  is the vertical depth of the freshwater outflow face at the shoreline (m). The Ghyben-Herzberg closure relation (above) is inserted in the vertically-averaged Boussinesq equations for freshwater, leading to a nonlinear system of equations, namely : steady-state mass conservation for freshwater (2); vertically integrated Darcy's law (3); & freshwater transmissivity (4) :

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = -\text{div}(\mathbf{Q}) \quad (2)$$

$$\mathbf{Q} = -T(H, Z_{SALT}, Z_{INF}, x, y) \mathbf{grad}(H) \quad (3)$$

$$T = \begin{cases} K(x, y) \times (H - Z_{INF}(x, y)) & \text{if } Z_{SALT} < Z_{INF} \\ K(x, y) \times (H - Z_{SALT}(x, y)) & \text{if } Z_{SALT} \geq Z_{INF} \end{cases} \quad (4)$$

where  $K(x, y)$  is hydraulic conductivity ( $\text{m s}^{-1}$ ),  $Z_{INF}$  is the impervious substratum level (m),  $Z_{SALT}$  is the salt/Freshwater interface level (m),  $Q$  is the Darcy specific discharge rate ( $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ),  $\Theta$  is the water content ( $\text{m}^3 \text{m}^{-3}$ ), and  $T$  the transmissivity ( $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ). Here we focus on steady state problems. For more details, see Ababou & Al-Bitar (2005).

Numerical simulations of seawater intrusion are carried out using the BigFlow code BF 2000 (Ababou & Trégarot, 2002). The model is based on a single generalized flux-divergence equation (conservative, mixed form) for either 3D or 2D plane flow. Space-time discretization is based on implicit finite volumes, leading to sparse nonlinear systems. These are solved using two interspersed loops: the outer loop implements fixed point (modified Picard) iterations; the inner loop solves the linearized system by preconditioned Conjugate Gradients (DSCG). The 2D plane flow option was specialized for sharp interface seawater intrusion problems (BF-SWIM2D).

### 3 CONTROL OF NUMERICAL ACCURACY AND ROBUSTNESS

#### 3.1 Continuation method for highly heterogeneous media

Some special considerations were given to the non-linear aspects of the SWIM problem. Indeed, Seawater Intrusion Modeling is “doubly non-linear” because of the non-linearity of the Dupuit Boussinesq equation (head-dependent transmissivity) and because of the nonlinearity due to the interception of the salt interface by the aquifer's substratum. This non-linearity is even stronger when the domain is highly heterogeneous ( $K(x, y)$ ). For these cases, we used a special iterative “re-start method”, also known as “continuation” or “homotopy” method. The continuation parameter is chosen to be  $\sigma_{\ln K}$ , the standard deviation of  $\ln K$ .

The method is implemented iteratively as follows. Step 1: we generate an aquifer with mildly heterogeneous log-permeability ( $\ln K(x,y)$ ) characterized by its mean, standard deviation, and covariance function, using the turning band method (Tompson et al., 1989). Step 2: we simulate seawater intrusion with the SWIM2D module for this first  $\ln K$  field. Step 3: we increase the heterogeneity of  $\ln K$  by incrementing  $\sigma_{\ln(K)}$  while maintaining the other parameters constant. Step 4: we simulate seawater intrusion using the  $\ln K$  field from step 3. Steps 3 and 4 are then iterated.

Since the numerical difficulty increases as  $\sigma_{\ln K}$  increases, we use a logarithmic function to control the  $\sigma_{\ln K}$  increment:

$$\frac{\sigma_i}{\sigma_N} = \frac{\ln(i+1)}{\ln(N+1)} \quad (5)$$

where  $\sigma_i$  is the standard deviation of the  $i^{\text{th}}$   $\ln K$  field,  $N$  is the number of increments,  $\sigma_N$  is the standard deviation of the objective (final) standard deviation. Other incremental functions have been tested; the logarithmic increment proved to be the most efficient.

Fig. 1(a) shows the values of  $\sigma_{\ln K}$  for 10 continuation steps (final value  $\sigma_{\ln K} = 4.0$ ). The results are analysed in Fig. 1(b), in terms of error norm vs iteration number. The root-mean-square norm of  $\delta H$  is used, where  $\delta H$  is the head variation over two successive iterations. This  $\delta H$  is to be compared to the total head variation of 1 meter along the mean flow path. The 2D random seawater intrusion problem was solved on a 1000x1000 node grid. The total CPU time for the 10 continuation steps was on the order of one day on a PC Intel Pentium-4 processor, in double precision.

Inside each continuation step, there are two interlooped solvers: (1) the inner loop is the iterative DSCG solver (stopping criterion  $\delta H < \varepsilon = 10^{-9}$  (m), and  $\text{ITER} \leq 1000$ ); (2) the outer loop is the fixed point (Picard) iteration solver (stopping criterion  $\delta H < \varepsilon = 10^{-6}$  and  $\text{ITER} \leq 20$ ). In Fig. 1(b), the average number of iterations within each continuation step is 18596. However the actual number of iterations per step increases with successive steps. The problem is more difficult as  $\sigma_{\ln K}$  increases.

The continuation algorithm, as well as file management and graphic tasks, have been implemented as an option in the GUI application (BF-Py) under development for the BigFlow code. The BF-Py application has been implemented under Python<sup>®3</sup> and using the wxPython<sup>®</sup> library.

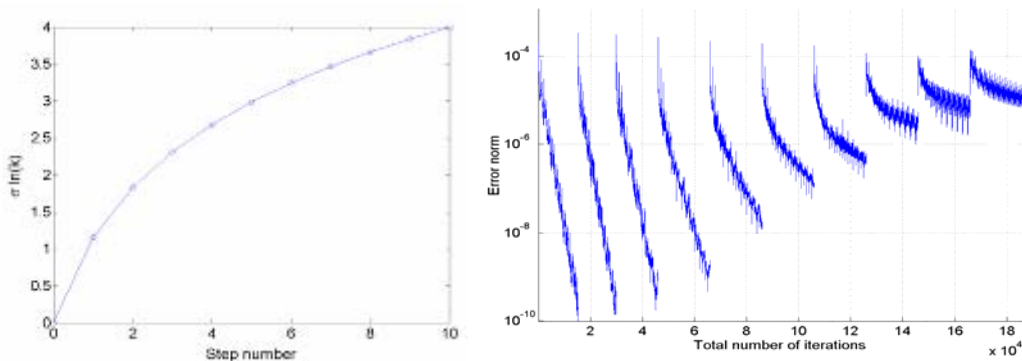


Fig. 1 a Evolution of  $\sigma_{\ln K}$  in the homotopy method with  $N = 10$  and  $\sigma_N = 4.0$  (left)

<sup>3</sup> Python is a freeware, Object Oriented Programming Language, available at <http://www.python.org>; wxPython is a freeware, GUI library, for the Python programming language, based on wxWindows.

Fig. 1 b Error norm for ten continuation steps (tens of thousands of iterations).

### 3.2 Numerical accuracy for high contrast simulations

One issue in simulating highly heterogeneous flows is to ensure numerical accuracy. For this purpose, double precision computations need to be implemented, rather than single precision. To inspect the solver's robustness under double precision computations, a simple configuration with high contrast field properties was used, as shown in Fig. 2(a). The computational domain consists of a square domain with constant permeabilities in which a bar shape with a different permeability is inserted perpendicularly to the flow direction and over the entire width. Fixed heads are applied in the direction of flow, and no flux Neumann conditions perpendicular to the flow.

This heterogeneous “bar shape” configuration has a  $\ln K$  contrast that can be expressed in terms of a geometric mean and a standard deviation (Ababou, 1988):

$$K_G = (K_1)^{\alpha_1} (K_2)^{\alpha_2} \quad \sigma_{\ln K} = \sqrt{\left[ \left( \ln \left\{ \frac{(K_1)^{\alpha_1}}{K_G} \right\} \right)^2 + \left( \ln \left\{ \frac{(K_2)^{\alpha_2}}{K_G} \right\} \right)^2 \right]} \quad (6)$$

where  $\alpha_i$  is the area fraction of the domain associated with permeability  $K_i$  ( $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ ).

We conducted seawater intrusion simulations for several values of the permeability contrast ( $K_1/K_2$  or  $\sigma_{\ln K}$ ) and we analysed mass balance (not shown here for lack of space). Mass balance remains quite good even for extremely high contrasts: the relative error on the net computed flux is 0.5 % for  $K_1/K_2 = 10^8$  or  $\sigma_{\ln K} = 5.58$ .

Fig. 2(b) shows the analytical solution and the numerical hydraulic head transect  $H(x)$  in the middle of the domain, for  $K_1/K_2 = 10^{+8}$ ; the local relative error is less than  $10^{-7}$ .

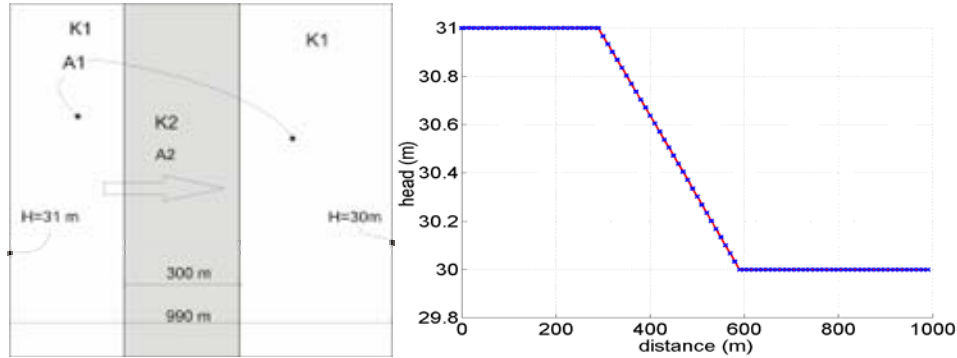


Fig 2 (a) Domain configuration (left).

Fig 2 (b) Numerical (x) and analytical (-) results for  $K_1/K_2 = 10^{+8}$  (right).

### 3.3 Robustness of the linear and non-linear system solvers

To complete the non-linear study, we examine in more detail the robustness of the DSCG solver interlooped with the nonlinear Picard solver. First, note that a steady simulation with BigFlow consists of one infinite time step. This is obtained by setting the mass storage term in the linearized equation to zero. The Picard iterations are used to linearize the resulting system.



Let us consider the 1D homogeneous case. In this case the linearized system is tri-diagonal. The CG-based solver should theoretically converge with a number of iterations smaller than or equal to the matrix dimension (Golub & Van Loan, 1989).. This theoretical result was observed experimentally with our double precision simulations using the DSCG solver.

Fig. 3(a) illustrates the results of the CG solver for one outer loop of the Picard iteration. The grid has  $1000 \times 1 \times 1$  internal nodes. The results show that convergence is slow until the 999<sup>th</sup> iteration is reached; then convergence occurs abruptly at the 999<sup>th</sup> iteration, within machine precision. This behaviour was also observed by Ababou (1996) for linear saturated flow problems.

Fig. 3(b) shows the numerical results for all interlooped iterations (Picard and DSCG). There is an increase in error at the beginning of each new Picard iteration, due to updates of the matrix coefficients. However, this error decreases with iterations, i.e., there is a global convergence of the nonlinear Picard iterations.

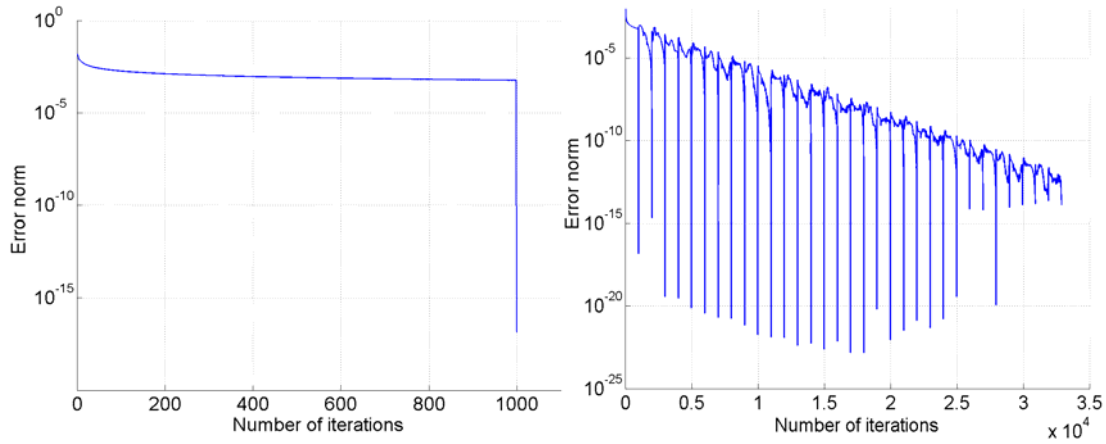


Fig. 3(a) Error norm of the DSCG matrix solver within a single Picard step; notice the abrupt convergence occurring at the 999th iteration (left).

Fig. 3(b) Error norm of the DSCG matrix solver for all Picard iterations (right).

## 4 NUMERICAL RESULTS AND ANALYSES

We now analyse the spatial statistics of the seawater wedge (interface elevation  $Z_{\text{SALT}}(x,y)$ ) for the 10 different levels of aquifer variability, as specified in the numerical continuation method. This is shown in Fig. 4(a) and Fig. 4(b).

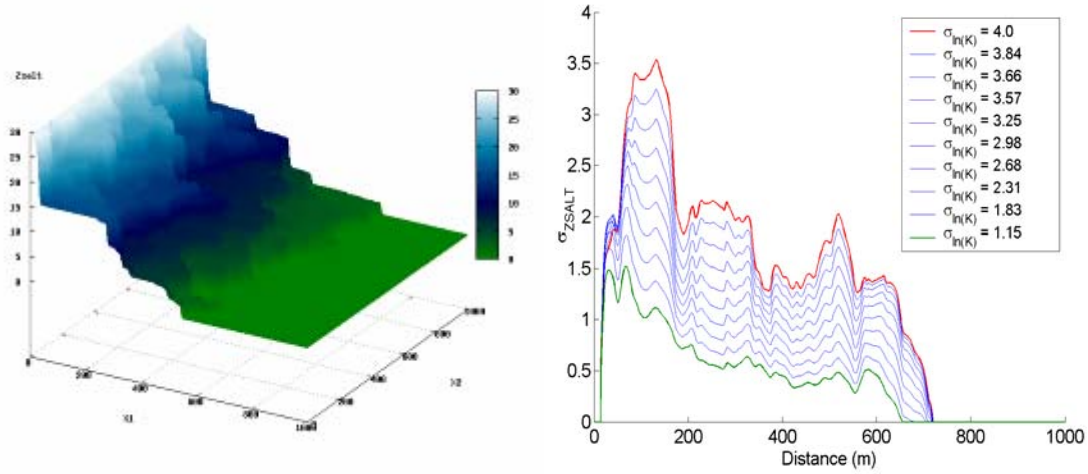


Fig. 4(a) Saltwater/freshwater interface  $Z_{\text{salt}}(x,y)$  for  $\sigma_{\ln K} = 4.0$  (left).

Fig. 4(b) Transverse profile of  $\sigma Z_{\text{salt}}$  versus distance ( $x$ ) from seashore, for 10 different values of  $\sigma_{\ln K}$  ranging from 1.0 to 4.0 (right).

Due to the randomness of the vertically integrated permeability  $K(x,y)$ , the resulting seawater wedge is very heterogeneous. This can be seen from Fig. 4(a), where  $Z_{\text{SALT}}(x,y)$  is shown for the case of largest variability ( $\sigma_{\ln K} = 4.0$ ). In addition, Fig. 4(b) shows the spatial moment  $\sigma_{Z_{\text{SALT}}}(x)$  plotted as a function of distance from the seashore, for  $\sigma_{\ln K} = 1.0$  up to  $\sigma_{\ln K} = 4.0$ . This extends results by Ababou & Al-Bitar (2005); they analysed  $\sigma_{Z_{\text{SALT}}}(x)$  using a perturbation approximation, valid up to  $\sigma_{\ln K} = 1.6$ .

## 5 CONCLUSIONS AND OUTLOOK

The seawater intrusion problem (sharp interface approach) in randomly heterogeneous coastal aquifers is computationally challenging for three reasons: (1) the problem is nonlinear due to the presence of two unknown surfaces (freshwater and saltwater); (2) large grids are needed in order to compute spatial statistics; (3) the condition of the system becomes worse with both grid size and random permeability contrast ( $\sigma_{\ln K}$ ).

We used different criteria and procedures to control numerical accuracy and performance. Mass balance was close to zero for most random aquifer simulations. Convergence of both inner iterations (CG) and outer iterations (Picard) were carefully controlled via stopping criteria and a posteriori analyses of convergence rates. We found that double precision computations were necessary for highly heterogeneous permeabilities. Finally, in order to overcome convergence problems due to large  $K$  contrasts ( $\sigma_{\ln K} \gg 1$ ), we introduced a  $\sigma$ -continuation method (homotopy).

The continuation method and other procedures developed in this paper are aimed at a better understanding of  $\sigma_{Z_{\text{SALT}}}(x)$ , i.e., the variability of seawater intrusion in highly heterogeneous aquifers. A robust perturbation theory is currently being considered for interpreting the results for  $\sigma_{\ln K} \gg 1$ . A previous perturbation theory (Ababou & Al-Bitar 2005) provided a fairly good fit for  $\sigma_{\ln K}$  up to 1.60. Possibly, the correct interpretation of the present numerical experiments requires, for  $\sigma_{\ln K} \gg 1$ , larger sampling domains (10 million nodes) and/or multiple replicates (Monte-Carlo). Other numerical developments include pumping well modelling, and efficient algorithms to deal with irregular 2D and 3D grid geometry for field applications.

## 6 Acknowledgements

This study is part of the European project SWIMED on coastal aquifer management, funded by the European Commission (Sustainable Water Management In MEDiterranean coastal aquifers): <http://www.crs4.it/EIS/SWIMED> .

## 7 REFERENCES

- Ababou R (1988) Three-dimensional flow in random porous media. Ph.D. thesis. M.I.T., Cambridge MA, USA.
- Ababou R. (1996) Random Porous Media Flow on Large 3-D Grids: Numerics, Performance, and Application to Homogenization. Chap.1, pp.1-25, in IMA Vol. N .79 Mathematics and its Applications: Environmental studies - mathematical, computational and statistical analysis. M.F.Wheeler ed., Springer, New-York, 410 pp.
- Ababou R. & Al-Bitar A. (2005) Random field approach to seawater intrusion in heterogeneous coastal aquifers: unconditional simulations and statistical analysis. In: Geostatistics for Environmental Applications, Renard P., Demougeot-Renard H., Froidevaux R. (eds.), Springer Verlag.
- Ababou R & Trégarot G (2002) Coupled Modeling of Partially Saturated Flows : Macro-Porous Media, Interfaces, and Variability. In: Proc. CMWR 02, Comput. Meth. Water Resour., June 2002, Delft, The Netherlands, Elsevier, 8 pp.
- Ababou R & Bagtzoglou A.C. (1993) BIGFLOW: a Numerical Code for Simulating Flow in Variably Saturated, Heterogeneous Geologic Media - Theory and User's Manual Ver.1.1.1. NUREG/CR-6028, Washington DC., USA.
- Tompson AFB, Ababou R, Gelhar LW (1989) Implementation of the Three-Dimensional Turning Bands Random Field Generator, 2227-2243. Water Resour. Res. 25(10).
- Golub G.H. & Van Loan C.F. (1989) Matrix computations. 2nd Ed., J. Hopkins Univ. Press, Baltimore, Maryland, 642 pp.

# **Chapitre V   MODELISATION 2D COUPLEE SURFACE / SOUTERRAIN AVEC OU SANS INTRUSION SALINE**

**TABLE DES MATIERES DU CHAPITRE V**

<b>V - 1 Introduction</b>	<b>80</b>
V - 1.1 Introduction	80
V - 1.2 Résumé du chapitre	80
<b>V - 2 Modèle d'onde diffusante 2D (hydraulique de surface)</b>	<b>81</b>
V - 2.1 Equations de Saint Venant 2D et coefficients de frottement	81
V - 2.2 Equation d'onde diffusive 2D et coefficients de frottement	82
<b>V - 3 Modèles équationnels d'écoulements couplés surface/souterrain (2D)</b>	<b>86</b>
V - 3.1 Introduction et résumé	86
V - 3.2 Couplage surface-souterrain	86
V - 3.3 Formulation mathématique du modèle bi-couches surface/souterrain	88
V - 3.4 Formulation du modèle bicouches surface/souterrain avec intrusion saline	89
<b>V - 4 Tests onde diffusante et couplages surface/souterrain</b>	<b>90</b>
V - 4.1 Validation de l'onde diffusante Manning 1D permanent	90
V - 4.2 Ecoulements couplés en géométrie simplifiée	95
<b>V - 5 Génération d'un Modèle Numérique de Terrain Intégré (Garonne)</b>	<b>100</b>
V - 5.1 Introduction	100
V - 5.2 Méthode Géostatistique	100
V - 5.3 MINT : Modèle Numérique Intégré de Terrain	103
V - 5.4 Méthodologie pour la construction d'un MINT	104
V - 5.5 Construction du MINT pour la Garonne	105
<b>V - 6 Simulation couplée du système nappe rivière de la Garonne (Toulouse-Moissac)</b>	<b>106</b>
V - 6.1 Echanges rivière-aquifère dans la Garonne	106
V - 6.2 Simulation couplée rivière-aquifère en 2D	107
<b>V - 7 Conclusions</b>	<b>110</b>

## V - 1 INTRODUCTION

### V - 1.1 Introduction

Dans plusieurs configurations, l'écoulement dans un système hydrologique est régi par les interactions entre l'écoulement en surface et l'écoulement souterrain. Dans ce type d'écoulement il est important de prendre en compte le couplage entre le milieu souterrain et les volumes d'eau en surface (rivière, lacs, ruissellement...).

Le couplage peut se faire implicitement ou itérativement.

Le **couplage itératif** consiste à faire des échanges entre les processus physiques à des instants déterminés. Le temps d'échange dépend du temps caractéristique de chaque processus et de la difficulté à résoudre le problème pour les codes à pas de temps adaptatif. Cette approche permet de faire du calcul séquentiel ou parallèle indépendant durant un ou plusieurs pas de temps. Une telle approche permet de réduire les demandes en mémoire de stockage, mais elle présente un algorithme moins stable car la solution de chacun des systèmes non-linéaires est obtenue en considérant une solution constante de l'autre processus durant un pas de temps donné. Ainsi les pas de temps doivent être petits, et la demande en temps calcul peut s'avérer coûteuse. A cet inconvénient vient s'ajouter le temps d'échange des données.

La méthode de **couplage implicite** consiste à écrire les équations de chacun des processus en considérant des termes d'échange (sources/puits) entre les différents processus et à les discrétiser. Ensuite, le système d'équations doit être assemblé dans un système algébrique global. L'inversion de la matrice globale de ce système, correspondant aux deux processus simultanément, permet d'obtenir une solution plus stable que dans le couplage itératif. Par contre, cette méthode est coûteuse en mémoire et elle implique un temps calcul commun aux deux processus. Des méthodes de décomposition de domaine et de calcul parallèle permettent de pallier à ces problèmes.

Une autre façon de faire du couplage implicite est de considérer une équation unique dont les coefficients sont modifiés dans plusieurs parties du domaine de calcul, associés à des processus physiques différents. Cette approche est inspirée principalement de l'analogie entre les équations décrivant l'écoulement en milieu souterrain et en surface. Elle permet d'assurer une certaine continuité des variables telles que la pression aux interfaces des différentes zones d'écoulement. C'est cette approche qu'on utilise dans ce chapitre.

Le problème du couplage est encore plus complexe lorsque le système rivière/souterrain est sujet à l'intrusion saline, comme c'est le cas dans les aquifères côtiers. La méthode la plus utilisée pour résoudre le problème de l'intrusion saline est l'approche de zone de diffusion, où l'on couple les équations d'écoulement à densité variable et l'équation de transport de sels (solutés). Cette dernière approche est passée en revue dans le chapitre 2. Or, en présence d'un écoulement de surface à cinétique rapide, ces modèles couplés écoulement-transport convergent plus difficilement.

L'approche interface abrupte à deux fluides (eau salée / eau douce) utilisée ici est plus adéquate. Cette approche conduit au couplage de deux équations d'écoulement, mais si l'on considère de plus que la zone salée est immobile, le système se réduit à une seule équation avec des coefficients non-linéaires et variables suivant la configuration du système.

### V - 1.2 Résumé du chapitre

Dans ce chapitre, les équations d'écoulement de pleine eau à surface libre sont présentées. Les équations d'écoulement de surface sont mises sous la forme d'une équation d'onde diffusante avec coefficients non-linéaires. Cette équation provient d'une simplification des équations de Saint-Venant, qui sont elles-mêmes verticalement intégrées (ou verticalement hydrostatiques). Il s'agit donc d'écoulements plans en (x,y) (2D). Cette formulation est reprise des travaux de Trégarot (2002). De plus, un nouveau modèle couplé surface/souterrain est présenté. Ce modèle utilise la

formulation diffusive en surface et les équations de Dupuit-Boussinesq en souterrain. Enfin une nouvelle complexité est ajoutée à ce système en introduisant l'intrusion saline.

Plusieurs applications et validations sont montrées dans ce chapitre, notamment : une validation en 1D de l'équation diffusive ; des tests simples pour le système couplé surface/souterrain avec ou sans intrusion saline ; et enfin une application aux écoulements couplés nappe-rivière-bancs de galets dans la vallée fluviale de la Garonne.

L'application sur la Garonne a conduit à l'élaboration d'une nouvelle méthodologie pour créer un Modèle Intégré Numérique de Terrain (MINT). Le MINT est un MNT (Modèle Numérique de terrain) qui 'intègre' de fortes anisotropies morphologiques, ainsi que de fortes variations locales et de fortes disparités de la résolution des mesures, notamment au voisinage des cours d'eau. Le MINT représente une information indispensable pour la modélisation couplée surface/souterrain.

Le modèle numérique utilisé pour faire les simulations est le code de calcul volumes finis BIGFLOW (2D/3D). Une description plus complète de ce code est présentée dans le chapitre 2. Dans ce chapitre, seule l'option 2D du code est utilisée (écoulements plans).

## V - 2 MODELE D'ONDE DIFFUSANTE 2D (HYDRAULIQUE DE SURFACE)

On développe d'abord les équations de Saint-Venant 2D (écoulements plans) avec différentes lois de frottement, puis on montre comment on peut en déduire une équation de type onde diffusante 2D, et enfin, on montre que ce type d'équation peut être reformulé sous la forme d'un modèle de Darcy généralisé, prenant en compte des pertes de charge quadratiques en vitesse, de la forme :  $-\text{grad } H = a V + b V |V|$ . Cette section est basée principalement sur les travaux développés à l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse ces dernières années, références suivantes : Ababou et Trégarot (2002), et Hénine (2006).

### V - 2.1 Equations de Saint Venant 2D et coefficients de frottement

Equations de Saint Venant 2D (Barré de St Venant 1871), qui peuvent être considérées comme une approximation des équations de Navier-Stokes verticalement intégrées. En incluant les termes empiriques de frottement (voir loi de perte de charge plus loin), ces équations s'écrivent comme suit, dans un repère cartésien (avec axe z vertical pointant vers le haut).

- L'équation de conservation de masse s'écrit :

$$\frac{\partial(\eta U_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\eta U_y)}{\partial y} + \frac{\partial Z_s}{\partial t} = 0 \quad (5.56)$$

- Les équations de conservation de quantité de mouvement s'écrivent :

$$\frac{\partial(\eta U_x)}{\partial t} + \frac{\partial(\eta U_x^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\eta U_x U_y)}{\partial y} = -g\eta \left[ \frac{\partial Z_s}{\partial x} + S_{fx} \right] \quad (5.57)$$

$$\frac{\partial(\eta U_y)}{\partial t} + \frac{\partial(\eta U_x U_y)}{\partial x} + \frac{\partial(\eta U_y^2)}{\partial y} = -g\eta \left[ \frac{\partial Z_s}{\partial y} + S_{fy} \right] \quad (5.58)$$

avec :

$Z_s(x,y,t)$ , $Z_{inf}(x,y)$ :	côtes de la surface libre $Z_s$ (m) et du fond $Z_{inf}$ (m), par rapport à un repère fixe tel que le niveau de la mer (axe Oz vertical, vers le haut);
$\eta(x,y,t)$ :	tirant d'eau (profondeur, water depth) : $\eta(x,y,t) \approx Z_s(x,y,t) - Z_{inf}(x,y)$
$U_x(x,y,t)$ , $U_y(x,y,t)$ :	composantes horizontales suivant Ox et Oy de la vitesse $\mathbf{U}$ (m/s),

représentant la moyenne verticale de la vitesse locale  $\mathbf{u}$  sur le tirant d'eau (de  $z=Z_{\text{inf}}$  à  $z=Z_{\text{inf}}+\eta$ ) ;  
 $S_{fx}, S_{fy}$  : composantes du gradient de perte d'énergie (m/m) dans les directions Ox et Oy (parfois appelées 'friction slopes') ;

On donne ci-dessous une expression semi-empirique de la loi de perte de charge, en termes du gradient de perte d'énergie ( $S_{fx}, S_{fy}$ ). Dans ce cas bidimensionnel, le rayon hydraulique  $R_H$  est confondu avec le tirant d'eau  $\eta$  (cette hypothèse est également valable dans les modèles filaires 1D pour des cours d'eau larges et/ou peu profonds) :

$$\begin{aligned} S_{fx} &= c_{xx}(\eta) \frac{|\mathbf{U}|}{\eta} U_x \\ S_{fy} &= c_{yy}(\eta) \frac{|\mathbf{U}|}{\eta} U_y \end{aligned} \quad (5.59)$$

où  $c_{ii}$  est un coefficient non-linéaire donné par :

$$\begin{aligned} c_{xx}(\eta) &= C_{xx} \eta^\alpha \\ c_{yy}(\eta) &= C_{yy} \eta^\alpha \end{aligned} \quad (5.60)$$

avec  $c_{ii}(\eta)$  en  $[(L/T)^2/L]$ , soit  $[m^{-1} s^2]$

Les  $c_{ii}(\eta)$  sont des coefficients de frottement selon les directions Ox et Oy, supposées directions principales d'anisotropie. En général, les  $c_{ii}(\eta)$  sont soit constants, soit faiblement variables en fonction du tirant d'eau  $\eta$ . Les  $c_{ii}(\eta)$  sont donnés ci-dessous (Tab.1) d'après les formules de Chézy, Manning et Darcy-Weisbach (Carlier, 1986 ; Chow et al., 1988).

**Tab.5.1** Expressions des termes de frottement données par Chézy, Manning et Darcy-Weisbach.

Formule de Chézy	Formule de Manning	Formule de Darcy-Weisbach
$c_{ii}(\eta) = C z_{ii}^{-2} \eta^0$ (5.61)	$c_{ii}(\eta) = M a_{ii}^2 \eta^{-1/3}$ (5.62)	$c_{ii}(\eta) = \frac{\lambda_{ii}}{8g} \eta^0$ (5.63)
unités : $[C z_{ii}] = [m^{1/2} \cdot s^{-1}]$	unités : $[M a_{ii}] = [m^{-1/3} \cdot s]$	unités : $[\lambda_{ii}] = [8g/C z_{ii}^2] = [\text{adim.}]$

Dans ce tableau  $Cz$  : est le coefficient de Chezy et  $Ma$  : est le coefficient de Manning (souvent noté « n » dans la littérature)  $[L^{-1/3} T]$  et  $\lambda$  : est le coefficient adimensionnel de Darcy-Weisbach.

Les coefficients  $Cz_{ii}$ ,  $Ma_{ii}$ , et  $\lambda_{ii}$  ( $i = x, y$ ) sont tous des paramètres de frottement dépendant entre autres de la nature du fond (sables, graviers, galets, etc.), de sa morphologie, des diverses obstructions à l'écoulement (embâcles), de la végétation, etc.

## V - 2.2 Equation d'onde diffusive 2D et coefficients de frottement

Pour modéliser les écoulements de « pleine eau » de type rivière ou plaine d'inondation, nous utilisons une version dégradée des équations de Saint Venant, dite équation d'onde diffusive ou diffusante (et plus exactement : onde cinématique diffusive).

On montre en effet – mais seulement en 1D - que l'équation de Saint Venant donne une équation d'onde diffusive si l'on peut négliger le taux de variation temporelle de la quantité de mouvement (ou de la vitesse), ce qui revient seulement à négliger l'accélération locale  $\partial U / \partial t$  (mais pas  $\partial Z_s / \partial t$  ni les termes d'accélération convective inertielle) dans les équations de Saint Venant.

De même, dans le plan  $(x, y)$ , une équation d'onde diffusive est envisageable. On acceptera ici la généralisation 2D, isotrope ou anisotrope, de l'équation d'onde diffusive pour les phénomènes à



variation lente, en gardant tout de même à l'esprit que le passage Saint Venant à l'onde diffusive fait intervenir des hypothèses plus fortes en 2D (x,y,t) qu'en 1D (x,t) <sup>4</sup>.

### V - 2.2.1 Onde diffusive 2D (cas général)

Si l'on néglige tous les termes d'accélération (locale et convective/inertielle) dans l'équation de quantité de mouvement 2D de Saint Venant, alors on obtient :

$$\frac{\partial Z_s}{\partial x} + S_{fx} = 0 \text{ et } \frac{\partial Z_s}{\partial y} + S_{fy} = 0 \quad (5.64)$$

En insérant la loi de perte de charge ci-dessus dans ces équations, on obtient :

$$\frac{\partial Z_s}{\partial x} = -c_{xx}(\eta) \frac{|U|}{\eta} U_x \text{ et } \frac{\partial Z_s}{\partial y} = -c_{yy}(\eta) \frac{|U|}{\eta} U_y \quad (5.65) \text{ et } (5.66)$$

Ces expressions, une fois mises au carré, et additionnées, nous permettent d'exprimer le module de la vitesse moyennée verticalement :

$$|U| = \eta^{1/2} \left[ \frac{1}{c_{xx}^2(\eta)} \left( \frac{\partial Z_s}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{c_{yy}^2(\eta)} \left( \frac{\partial Z_s}{\partial y} \right)^2 \right]^{1/4} \quad (5.67)$$

Ceci, avec les équations (5.64) et (5.65), nous permet de ré-exprimer les vitesses moyennées  $U_x$  et  $U_y$  en fonction du tirant d'eau  $\eta$  et des pentes locales de la surface libre :

$$U_x = \frac{-1}{c_{xx}(\eta) \left[ \frac{1}{c_{xx}^2(\eta)} \left( \frac{\partial Z_s}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{c_{yy}^2(\eta)} \left( \frac{\partial Z_s}{\partial y} \right)^2 \right]^{1/4}} \eta^{1/2} \frac{\partial Z_s}{\partial x} \quad (5.68)$$

$$U_y = \frac{-1}{c_{yy}(\eta) \left[ \frac{1}{c_{xx}^2(\eta)} \left( \frac{\partial Z_s}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{c_{yy}^2(\eta)} \left( \frac{\partial Z_s}{\partial y} \right)^2 \right]^{1/4}} \eta^{1/2} \frac{\partial Z_s}{\partial y} \quad (5.69)$$

avec (5.14) et (5.15), l'équation de conservation de masse devient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z_s}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x} \left( \eta^{1/2} c_{xx}(\eta)^{-1} \left[ \frac{1}{c_{xx}^2(\eta)} \left( \frac{\partial Z_s}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{c_{yy}^2(\eta)} \left( \frac{\partial Z_s}{\partial y} \right)^2 \right]^{-1/4} \eta^\circ \frac{\partial Z_s}{\partial x} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left( \eta^{1/2} c_{yy}(\eta)^{-1} \left[ \frac{1}{c_{xx}^2(\eta)} \left( \frac{\partial Z_s}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{c_{yy}^2(\eta)} \left( \frac{\partial Z_s}{\partial y} \right)^2 \right]^{-1/4} \eta^\circ \frac{\partial Z_s}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (5.70)$$

Cette dernière équation de conservation de masse s'écrit aussi :

---

<sup>4</sup> R. Ababou (circa 2000) montre que l'équation obtenue en négligeant les termes d'accélération dans Saint Venant 2D, est différente de la version 2D de l'équation d'onde diffusive, même si elle en est qualitativement proche. Voir par exemple le rapport du projet « EiCRIN » (2000) sur la propagation des crues rapides et les risques d'inondation.

$$\frac{\partial Z_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \hat{T}_{xx} \frac{\partial Z_s}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \hat{T}_{yy} \frac{\partial Z_s}{\partial y} \right) \quad (5.71)$$

avec les expressions de  $\hat{T}_{xx}$  et de  $\hat{T}_{yy}$  suivantes :

$$\hat{T}_{xx} = \frac{\eta^{1/2}}{c_{xx}(\eta) \left[ \frac{1}{c_{xx}^2(\eta)} \left( \frac{\partial Z_s}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{c_{yy}^2(\eta)} \left( \frac{\partial Z_s}{\partial y} \right)^2 \right]^{1/4}} \eta \quad (5.72)$$

$$\hat{T}_{yy} = \frac{\eta^{1/2}}{c_{yy}(\eta) \left[ \frac{1}{c_{xx}^2(\eta)} \left( \frac{\partial Z_s}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{c_{yy}^2(\eta)} \left( \frac{\partial Z_s}{\partial y} \right)^2 \right]^{1/4}} \eta \quad (5.73)$$

L'équation finalement obtenue est l'équation d'onde diffusive 2D dans le cas le plus général (anisotrope), exprimée dans un repère horizontal. Cette forme de l'équation d'onde diffusive, associée à la formule de Manning comme loi de perte de charge, a été notamment proposée et résolue numériquement par Hromadka et al. (1985) et Di Giammarco et al. (1996).

#### V - 2.2.2 Onde diffusive 2D isotrope avec formule de Manning

On obtient, dans le cas de coefficients de frottement isotropes ( $c_{xx} = c_{yy} = c$ ) :

$$\hat{T} = \frac{\eta^{1/2}}{\left[ c^2(\eta) \left( \frac{\partial Z_s}{\partial x} \right)^2 + c^2(\eta) \left( \frac{\partial Z_s}{\partial y} \right)^2 \right]^{1/4}} \eta \quad (5.74)$$

Ceci peut encore s'écrire sous la forme  $\hat{T} = \hat{K} \eta$  avec :

$$\hat{K} = \frac{\eta^{1/2}}{c(\eta)^{1/2} \left[ \left( \frac{\partial Z_s}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial Z_s}{\partial y} \right)^2 \right]^{1/4}} = \frac{\eta^{1/2}}{c(\eta)^{1/2} \|\nabla \mathbf{Z}_s\|^{1/2}} \quad (5.75)$$

Dans le cas d'une loi de frottement de type Manning, avec  $c_{ii}(\eta) = (Ma_{ii})^2 \eta^{-1/3}$ , on obtient :

$$\hat{T} = \hat{K} \eta = \frac{\eta^{5/3}}{Ma \|\nabla \mathbf{Z}_s\|^{1/2}} \quad \text{et} \quad \hat{K} = \frac{\eta^{2/3}}{Ma \|\nabla \mathbf{Z}_s\|^{1/2}} \quad (5.76)$$

On remarque qu'il apparaît des coefficients effectifs de conductance et de transmittance, et que ces coefficients hydrauliques sont non linéaires : ils dépendent non seulement du tirant d'eau  $\eta = Z_s - Z_{INF}$ , mais aussi du gradient piézométrique  $\nabla \mathbf{Z}_s$ .

Note : il ne faut pas confondre le coefficient de conductance effectif de l'onde diffusante, avec les divers coefficients de conductivité dénotés  $K_s$  et  $K_r$  dans la loi de Darcy-Ward.

#### V - 2.2.3 Analogie entre l'onde diffusive 2D et l'écoulement de Darcy-Ward 3D

La paramétrisation de l'équation d'onde diffusante 2D est implémentée par analogie avec le cas des écoulements en milieux poreux 3D à saturation variable  $\theta(h)$  et à perte de charge

linéaire/quadratique, i.e., la loi de Darcy/Ward-Forchheimer implémentée dans BIGFLOW (Trégarot, 2002).

La loi de Darcy-Ward fait intervenir les notions de conductivité absolue  $K$ , conductivité à saturation  $K_S$  et conductivité relative  $K_R$ . Dans le cas isotrope, la formulation en 3D est la suivante (rappelons qu'il s'agit ici de milieux poreux 3D où n'apparaissent que des conductivités, pas des transmissivités) :

$$\text{Conservation de masse : } \frac{\partial \theta_e}{\partial t} = \text{div}(\tilde{\mathbf{K}} \nabla h) + \text{div}(\tilde{\mathbf{K}} \mathbf{g}_B) \quad (5.77)$$

$$\text{Loi de perte de charge : } \tilde{K}(h, \nabla H) = \frac{2K_S}{\delta + (\delta^2 + 4\gamma K(h)^{3/2} \|\nabla H\|)^{1/2}} K_R(h) \quad (5.78)$$

avec:

$\delta = 1$  : pertes de charge linéaires (Darcy classique) ;

$\gamma = C/(g\nu)^{1/2}$  ;  $C = 0.55$  (constante adimensionnelle d'Ergun) ;

$K(h) = K_S K_R(h)$ .

Cette formulation est, essentiellement, la formulation générique du code BigFlow. Elle provient d'une reformulation de la loi généralisée linéaire/quadratique combinant additivement Darcy et Forchheimer. Pour obtenir l'équation d'onde diffusante 2D / Manning, il faut utiliser la table de correspondance suivante :

Correspondance	Darcy Ward 3D	Onde diffusante 2D
$h \equiv \eta$ ( <b>rappel : <math>\eta = Z_S - Z_{INF}</math></b> )	pression capillaire	tirant d'eau
$H \equiv Z_S$	charge hydraulique	cote piézométrique (surface libre)
$\theta_e(\eta) \equiv 1.\eta$ ( <b>porosité rivière=1</b> )	teneur en eau	stock d'une colonne d'eau
$\tilde{K}(h, \nabla H) = \hat{T}(\eta, \nabla Z_S)$	conductance non linéaire	transmittance non linéaire
$\mathbf{g}_B \equiv \nabla Z_{INF}(x, y)$	force de volume gravitaire	pente du lit

et les paramètres suivants :

$\delta = 0$  : ceci traduit l'absence de pertes de charge linéaires dans l'onde diffusante classique<sup>5</sup>;

$\gamma = 1$  : pertes de charge quadratiques (les coefficients sont implémentés par  $K_S$  et  $K_R$ )

$K(h) = K_S$  (ceci tout en conservant le terme  $K_R(h)$ ).

En substituant ces variables et paramètres, on obtient :

<sup>5</sup> Ceci est nécessaire pour implémenter les formules classiques de type Chézy, Manning, etc. Cependant, en réalité, pour les écoulements très faibles, rampants et/ou à très faible tirant d'eau, il y a un régime de pertes de charges linéaires de type Darcy-Stokes (Ababou, 1998).

$$\hat{T}(\eta, \nabla Z_s) = \frac{K_s^{1/4}}{\|\nabla Z_s\|^{1/2}} K_R(h) \quad (5.79)$$

Enfin, pour implémenter en particulier la loi de Manning, il suffit d'identifier l'équation précédente avec :

$$\hat{T}(\eta, \nabla Z_s) = \frac{\eta^{5/3}}{Ma \|\nabla Z_s\|^{1/2}} \quad (5.80)$$

Pour obtenir identité, on voit qu'il suffit de prendre dans les coefficients de BIGFLOW :

$$K_s = Ma^{-4} \text{ et } K_R(\eta) = \eta^{5/3}.$$

Par ailleurs, une autre formulation de cette identification est possible en ré-écrivant la loi de Manning sous la forme :

$$c(\eta) = C \eta^\alpha \text{ avec } C = Ma^2 \text{ et } \alpha = -1/3.$$

On voit alors qu'on peut identifier les coefficients génériques de BIGFLOW comme suit en fonction des coefficients de perte de charge C et  $\alpha$  :

$$K_s = 1/C^2 \text{ et } K_R(\eta) = \eta^{(3-\alpha)/2} \quad (5.81)$$

Plus généralement, la relation d'équivalence ci-dessus devrait être valable pour toute loi de perte de charge :

Manning :	$C_{ii} = Ma^{-2}$	et	$\alpha = -1/3$ ;
Chézy :	$C_{ii} = Cz^2$	et	$\alpha = 0$ ;
Darcy-Weisbach :	$C_{ii} = \lambda/8g$	et	$\alpha = 0$ .

## V - 3 MODELES EQUATIONNELS D'ÉCOULEMENTS COUPLES SURFACE/SOUTERRAIN (2D)

### V - 3.1 Introduction et résumé

Dans ce paragraphe, on présente une méthode de couplage intégré (fortement implicite) des écoulements surface/souterrain, basée sur un modèle à une seule équation qui suppose la continuité de la cote de la surface libre ou de la charge hydraulique  $H(x,y,t)$  à l'interface nappe-rivière (ou plus généralement entre les deux zones d'écoulement surface/souterrain).

Le couplage proposé en 2D implique une continuité de la charge hydraulique, et ceci implique que les décrochements de nappe ne peuvent pas être pris en compte, et que le volume d'eau nappe-rivière doit rester connexe. Dans ce chapitre, deux cas sont prévus :

- le couplage surface/souterrain sans intrusion saline ;
- le couplage surface souterrain avec intrusion saline.

### V - 3.2 Couplage surface-souterrain

On considère un système à deux couches correspondant aux régions d'écoulement de surface et d'écoulement souterrain. On définit les surfaces suivantes (voir fig. 5.1) :

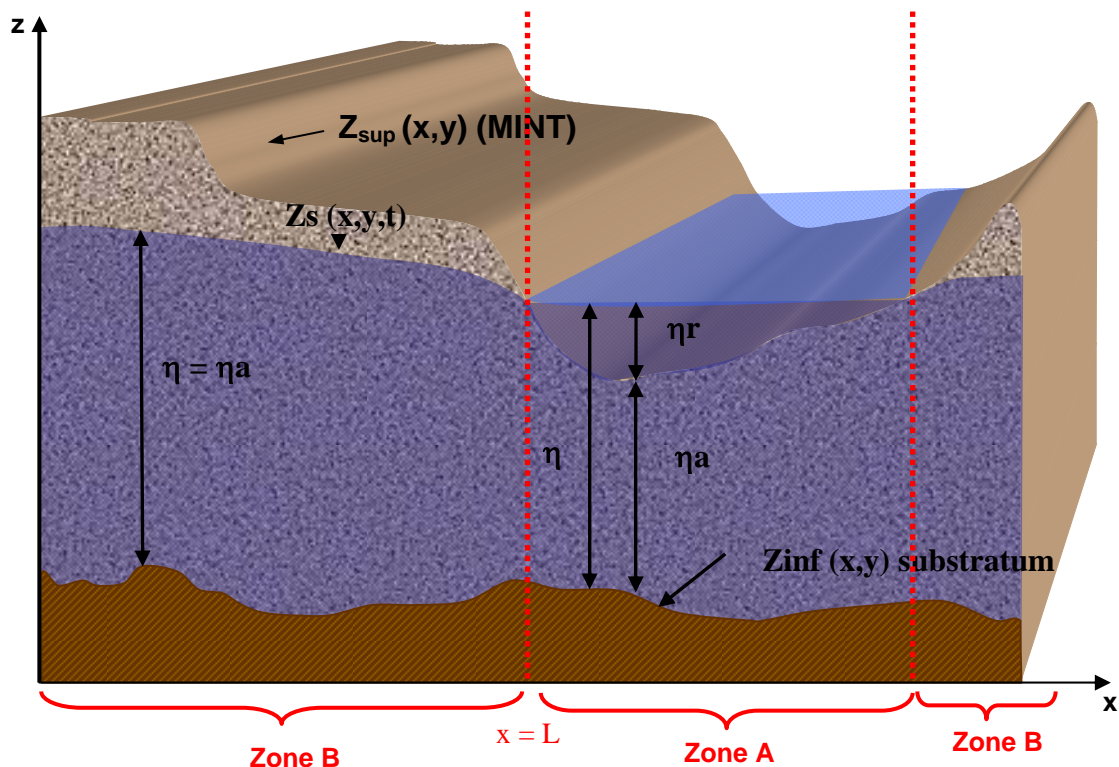
- $Z_{SUP}(x,y)$  : représente le MINT (Modèle Intégré Numérique de Terrain) qui correspond à un MNT incluant les cours d'eau ; une méthode combinant interpolation et géostatistique pour le calcul du MINT est présentée dans la section V.5 de ce chapitre.
- $Z_{INF}(x,y)$  : cette surface définit la cote du substratum ('bathymétrie' de la nappe).

- $Z_s(x,y)$ : c'est la surface libre de l'eau ; elle représente la charge hydraulique et donc l'inconnue du problème ; dans le sous sol elle est associée au niveau de la nappe et en surface elle donne le niveau de la rivière ; elle est continue à l'interface des deux régions.
- $\eta(x,y)$ : on peut aussi définir le tirant d'eau ( $\eta_r$ ) dans la rivière et dans l'aquifère ( $\eta_a$ ).

Le modèle à bi-couche est utilisé pour coupler les écoulements 2D au sein de deux couches superposées : une couche dite inférieure, comprise entre deux surfaces de cotes respectives  $Z_{inf}(x,y)$  et  $Z_{sup}(x,y)$ , et une couche dite supérieure reposant sur la surface de cote  $Z_{sup}(x,y)$ . La nappe est comprise entre la surface inférieure de cote  $Z_{inf}(x,y)$  sur laquelle elle repose, et l'unique surface libre de cote  $Z_s(x,y,t)$ , située soit dans la couche inférieure, soit dans la couche supérieure. La zone saturée délimitée par le substratum  $Z_{inf}$  et la surface libre  $Z_s$ , est donc continue, comme pour le modèle à une couche.

Les écoulements au sein de chaque couche peuvent être de même nature (e.g., régis dans chaque couche par l'équation de Boussinesq), ou de nature différente (e.g., équation de Boussinesq dans une couche, et onde diffusive dans l'autre). Ainsi, plusieurs configurations d'écoulements sont possibles :

- écoulements dans un aquifère stratifié horizontalement (bi-couche);
- écoulements dans une plaine alluviale constituée d'un cours d'eau connecté à sa nappe d'accompagnement (figure 5.1) ;
- affleurement de nappe en un point bas d'un versant (dans un modèle comme MODFLOW, ces affleurements sont modélisés par une limite à potentiel imposé, là où le taux d'infiltration de la pluie est supérieur aux possibilités de stockage de la nappe) ;
- écoulements dans un réseau de rivières souterraines (couche inférieure), alimentées par le drainage d'un massif poreux sus-jacent (couche supérieure).



**Fig. 5.1** Représentation schématique en perspective d'un modèle d'écoulement plan à deux couches. (Voir la section V.3.2 pour la description des variables).

### V - 3.3 Formulation mathématique du modèle bi-couches surface/souterrain

#### V - 3.3.1 Equations de la zone A : système aquifère/rivière

On considère la configuration décrite dans la figure 5.1. Dans la Zone A (zone composée d'un système aquifère/rivière), l'écoulement est décrit par les équations suivantes.

Dans la rivière, l'équation d'écoulement est donnée par :

$$\frac{\partial \theta_r \eta_r}{\partial t} = \text{div}(T_r \nabla \eta_r + T_r \nabla Z_{\text{sup}}) \quad (5.82)$$

Dans l'aquifère, l'écoulement est décrit par :

$$\frac{\partial \theta_a \eta_a}{\partial t} = \text{div}(T_a \nabla \eta_a + T_a \nabla Z_{\text{inf}}) \quad (5.83)$$

où :

- $\theta_r$ ,  $\theta_a$  sont respectivement la porosité effective dans la rivière ( $\theta_a = 1$ ) et dans l'aquifère ;
- $T_r$ ,  $T_a$  sont respectivement la transmissivité équivalente dans la rivière et dans l'aquifère ;
- $\eta_r$ ,  $\eta_a$  sont respectivement le tirant d'eau dans la rivière et dans l'aquifère.

Dans le cas de la rivière, le gradient gravitaire est donné par la pente de la surface du fond de la rivière, tandis que dans le cas de la nappe, le gradient gravitaire dépend de la pente du substratum.

Pour obtenir une équation unique couplant les écoulements nappe rivière dans la zone A, on propose de superposer les équations d'écoulement dans la rivière et dans l'aquifère. Cette opération est assimilable à une intégration verticale des deux équations de conservation de masse, dans le cadre des hypothèses d'écoulements plans régnant dans chaque couche. En additionnant l'écoulement verticalement dans les deux systèmes on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} [\theta_r \eta_r + \theta_a \eta_a] = \text{div}(T_r \nabla \eta_r + T_r \nabla Z_{\text{sup}} + T_a \nabla \eta_a + T_a \nabla Z_{\text{inf}}) \quad (5.84)$$

Cette opération implique que la lame d'eau est continue entre la rivière et l'aquifère. L'hypothèse sous jacente est qu'il ne peut y avoir un décrochage entre la rivière et sa nappe d'accompagnement. D'après la configuration géométrique des 'couches' dans la Zone A, on a :

$$\eta = \eta_r + \eta_a \text{ et } \eta_a = Z_{\text{sup}} - Z_{\text{inf}} \quad (5.85)$$

où  $\eta$  est le tirant d'eau total. En remplaçant  $\eta_a$  et  $\eta_r$  dans l'eq (5.84), on obtient donc :

$$\frac{\partial}{\partial t} [\theta_r \eta_r + \theta_a \eta_a] = \text{div}(T_r \nabla \eta + T_r \nabla Z_{\text{inf}} + T_a \nabla Z_{\text{sup}}) \quad (5.86)$$

#### V - 3.3.2 Zone B : écoulement souterrain seul

Dans la Zone B (zone d'écoulement souterrain seul), l'écoulement dans l'aquifère est régi par :

$$\frac{\partial \theta_a \eta_a}{\partial t} = \text{div}(T_a \nabla \eta_a + T_a \nabla Z_{\text{inf}}) \quad (5.87)$$

Dans ce cas on a :

$$\eta = \eta_a \text{ et } \eta_r = 0 \quad (5.88)$$

Ainsi l'équation d'écoulement s'écrit :

$$\frac{\partial \theta_a \eta}{\partial t} = \text{div}(T_a \nabla \eta + T_a \nabla Z_{\text{inf}}) \quad (5.89)$$

### V - 3.3.3 Equation unique d'écoulement pour les deux zones A et B

A partir des équations élaborées dans les zones A et B on peut proposer un modèle unique qui s'applique aux deux zones :

$$\frac{\partial \theta_e}{\partial t} = \text{div}(\hat{T}' \nabla \eta + \hat{T}' \nabla Z_{\text{inf}} + \hat{T}'' \nabla Z_{\text{sup}}) \quad (5.90)$$

où  $\theta_e$  est la porosité effective donné par :  $\theta_e = \theta_a \eta_a + \theta_r \eta_r$

De même,  $\eta$  est un tirant d'eau total, donné par :  $\eta = \eta_r + \eta_a$

Trois termes de gradients interviennent dans cette équation : un terme de gradient de charge hydraulique, un terme de gradient gravitaire qui dépend de la pente du substratum, et un terme de gradient gravitaire qui dépend de la pente du fond de rivière. Les coefficients  $T'$  et  $T''$  traduisent les transmissivités effectives de l'aquifère, de la rivière, et/ou de l'ensemble du système nappe-rivière :

$$\begin{aligned} \hat{T}' &= \omega T_a + \lambda T_r \\ \hat{T}'' &= \lambda(T_a + \omega T_r) \end{aligned} \quad (5.91)$$

où      pour  $\eta_r = 0 \rightarrow \{\omega = 1 \text{ et } \lambda = 0\}$   
           pour  $\eta_r \neq 0 \rightarrow \{\omega = 0 \text{ et } \lambda = 1\}$

On peut enfin vérifier la continuité de pression ou de charge à l'interface des zones A et B. On se place au niveau de l'abscisse  $x = L$  entre la zone A et la zone B (voir figure 5.1) :

$$\text{pour } x \rightarrow L : \begin{cases} \eta \rightarrow \eta_a \\ \eta_a = Z_{\text{sup}} - Z_{\text{inf}} \\ \eta_r \rightarrow 0 \end{cases}$$

En insérant ceci dans l'équation (5.90) pour  $x \rightarrow L^-$  on obtient :

$$\frac{\partial \theta_a \eta}{\partial t} = \text{div}(T_a \nabla \eta + T_a \nabla Z_{\text{inf}}) \quad (5.92)$$

Et en insérant ces mêmes résultats dans l'équation (5.90) pour  $x \rightarrow L^+$  on obtient :

$$\frac{\partial \theta_a \eta}{\partial t} = \text{div}(T_a \nabla \eta + T_a \nabla Z_{\text{inf}}) \quad (5.93)$$

Ainsi la continuité de la charge hydraulique est bien assurée entre les zones A et B.

### V - 3.4 Formulation du modèle bicouches surface/souterrain avec intrusion saline

Dans le cas où l'aquifère est soumis à l'intrusion saline, on utilise pour l'écoulement dans l'aquifère le modèle 2D plan présenté dans le chapitre IV. Le même modèle développé dans le paragraphe précédent reste valable sauf que le terme de transmissivité dans la zone aquifère est modifié de façon à prendre en compte la présence de la zone d'eau salée (voir figure 5.2).

La position du biseau est déterminée à l'aide de l'hypothèse de Ghyben-Herzberg par :

$$Z_{\text{SALT}} = Z_{\text{SEA}} - \frac{(H - Z_{\text{SEA}})}{\varepsilon} - \Delta Z \quad (5.94)$$

où :  $Z_{\text{sea}}$  est le niveau de la mer ;

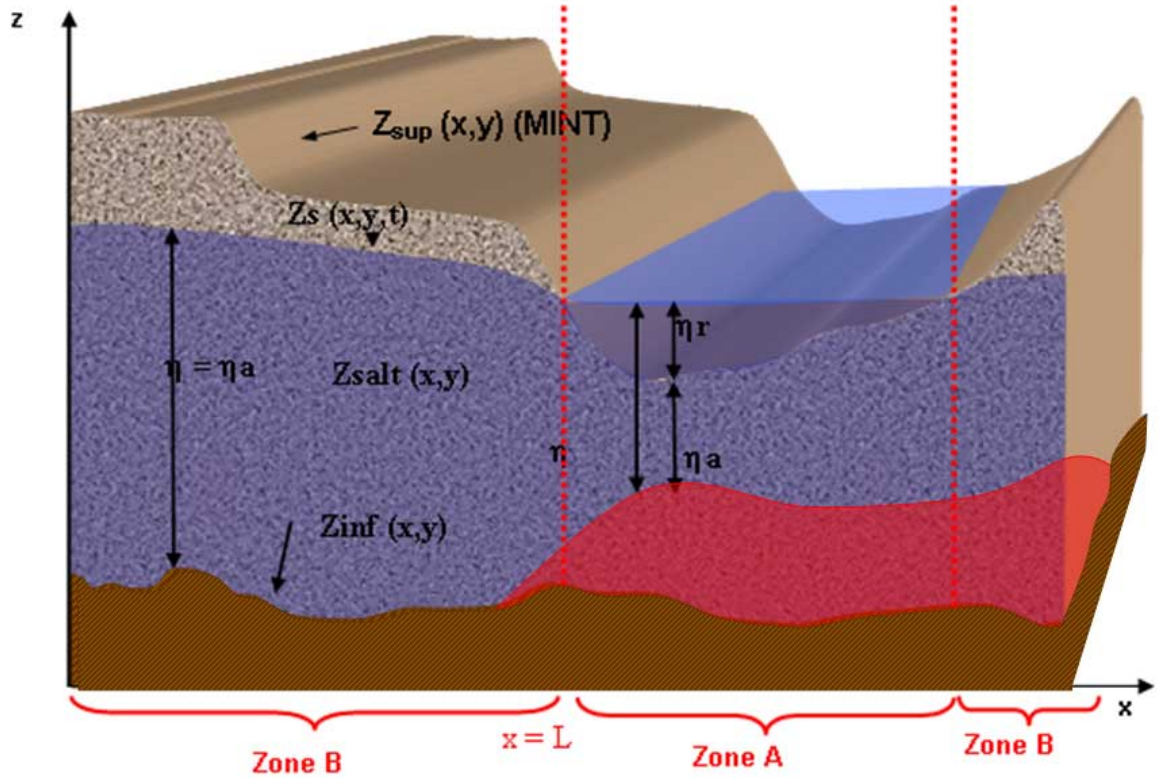
$\varepsilon = \frac{\rho_s - \rho_F}{\rho_F} \approx 1/40$  est le contraste de densité ;

$\Delta Z$  est l'épaisseur de l'exutoire d'eau douce, calculée séparément par solution analytique.

Le biseau salé est pris en compte dans le calcul du tirant d'eau en modifiant comme suit la variable  $Z_{inf}(x,y)$  :

$$Z_{inf} = \max(Z_{inf}, Z_{salt}) \quad (5.95)$$

Cette modification revient à remplacer le paramètre  $Z_{inf}(x,y)$  par l'inconnue  $Z_{salt}(x,y,t)$  dans la zone du biseau salé.



**Fig. 5.2.** Représentation schématique d'un modèle des écoulements plans bicouches avec intrusion saline (vu ici en perspective).

#### V - 4 TESTS ONDE DIFFUSANTE ET COUPLAGES SURFACE/SOUTERRAIN

##### V - 4.1 Validation de l'onde diffusante Manning 1D permanent

Le code BIGFLOW a été préalablement validé pour un certain nombre de configurations d'écoulements (Trégarot 2000) :

- aquifère horizontal à 1 couche et 2 couches ;
- écoulement de surface 1D sur un lit incliné ou non (sans couplage).

Des solutions analytiques simples sont disponibles pour ces cas testes. Une de ces solutions est reproduite ci-dessous (validation analytique onde diffusante 1D permanent).

##### V - 4.1.1 Test onde diffusante 1D permanent (lit horizontal)

Le modèle d'onde diffusive est comparé à la solution analytique de l'onde diffusante en régime permanent 1D sur un canal (ou une rivière) à fond horizontal avec une section uniforme.



Nous simulons avec BIGFLOW l'écoulement permanent 1D dans un canal horizontal, de section uniforme, de coefficient de rugosité de Manning  $Ma$  uniforme, d'extension longitudinale  $L$  et limité en amont et en aval par deux réservoirs de cotes respectives  $Z_{s0}$  et  $Z_{sL}$ . Les valeurs des paramètres utilisés sont :

$$Ma = 0.015 \text{ m}^{-1/3} \cdot s$$

$$L = 100 \text{ m}$$

$$Z_{s0} = 1.5 \text{ m}$$

$$Z_{sL} = 0.5 \text{ m}$$

Pour ce problème d'écoulement permanent 1D, l'équation qui régit l'écoulement dans le canal s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1/Ma^2}{\left[ \frac{1}{Ma^4} \left( \frac{\partial Z_s}{\partial x} \right)^2 \right]^{1/4}} \eta^{5/3} \frac{\partial Z_s}{\partial x} \right] = 0 \quad (5.96)$$

Soit en supposant le gradient (5.97) de même signe sur toute la longueur du canal.

$$\frac{\partial Z_s}{\partial x} = \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial Z_{\text{inf}}}{\partial x} \quad (5.97)$$

et

$$\frac{1}{Ma} \sqrt{|\partial Z_s / \partial x|} \eta^{5/3} = C \quad (5.98)$$

d'où :

$$\frac{\partial \eta}{\partial x} = C \eta^{-10/3} - \frac{\partial Z_{\text{inf}}}{\partial x} \quad (5.99)$$

Cette équation différentielle admet une solution simple pour un canal horizontal, ( $\partial Z_{\text{inf}} / \partial x = 0 \rightarrow \eta = Z_s$ ), et avec les conditions limites  $Z_s(0) = Z_{s0}$  et  $Z_s(L) = Z_{sL}$ . Nous obtenons, avec  $Z_{sL} > Z_{s0}$ , la solution analytique suivante pour la cote de la surface libre :

$$Z_s(x) = \left[ Z_{s0}^{13/3} - \frac{Z_{s0}^{13/3} - Z_{sL}^{13/3}}{L} x \right]^{3/13} \quad (5.100)$$

Ce qui donne, de plus, le débit spécifique ( $\text{m}^2/\text{s}$ ) constant :

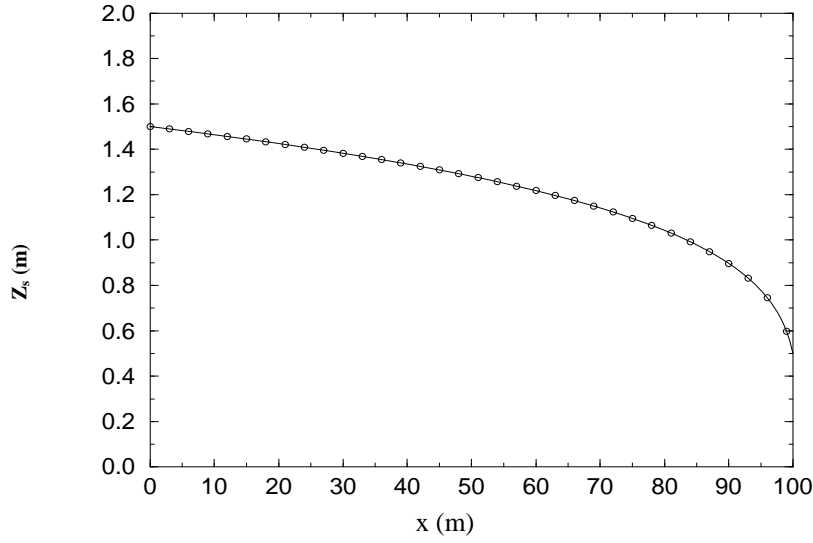
$$Q_{sx} = \frac{1}{Ma} \sqrt{\partial Z_s / \partial x} \eta^{5/3} = \frac{1}{Ma} \sqrt{\frac{3}{13} \frac{Z_{s0}^{13/3} - Z_{sL}^{13/3}}{L}} \quad (5.101)$$

La figure 5.3 montre la comparaison du profil  $Z_s(x)$  analytique et du profil  $Z_s(x)$  numérique (BigFlow). Le profil est correctement simulé. Le débit spécifique est aussi correctement calculé :

Calcul analytique :  $Q_{s\text{-ana}} \approx 7.676 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  ;

Calcul numérique :  $Q_{s\text{-num}} \approx 7.678 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  ;

L'erreur relative sur le débit est de 0.03 %.



**Fig. 5.3** Position de la surface libre  $Z_s(x)$  dans le cas d'un canal uniforme sur un fond horizontal. Comparaison entre solutions numérique ( o ) et analytique ( - ) (d'après Trégarot 2000).

#### V - 4.1.2 Onde diffusive 1D en régime transitoire (rupture de pente)

Le test précédent a été repris en régime transitoire par Ababou R. et Trégarot G. (2000). Ce test transitoire a été nommé « rupture de digue » ou « rupture d'un barrage ».

##### ■ Introduction

Les équations, dites aussi « shallow water equations », s'appliquent à des écoulements à surface libre, larges et peu profonds. Ce sont les équations de Barré de Saint Venant (1871), mises sous la forme 2D. Elles sont établies à partir des équations de Navier-Stokes, moyennées sur le tirant d'eau  $\eta$ , et des hypothèses suivantes:

- la densité de l'eau est constante (écoulement incompressible) et uniforme;
- la distribution verticale de pression est hydrostatique : dans un repère cartésien (O,x,y,z), l'axe Oz étant vertical orienté vers le haut,  $H = h + z \approx Z_s$ .

Cette dernière hypothèse implique un écoulement quasi-horizontal, ce qui peut se justifier pour des pentes du fond ( $z = Z_{sup}$ ) et de la surface libre ( $z = Z_s$ ) relativement faibles. On obtient les équations de Saint-Venant (voir plus haut), avec :

- $Z_s(x,y,t)$ ,  $Z_{sup}(x,y)$  : cotes de la surface libre et du fond ( $\eta = Z_s - Z_{sup}$ );
- $U(x,y,t)$ ,  $V(x,y,t)$  : vitesses moyennées de l'écoulement dans les directions x et y;
- $S_{fx}$ ,  $S_{fy}$  : pentes de frottement dans les directions x et y;

En ignorant les termes d'accélération locale et convective, on obtient les équations d'**ondes diffusantes** (voir plus haut et ci-dessous) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\eta U)}{\partial x} + \frac{\partial(\eta V)}{\partial y} + \frac{\partial Z_s}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial Z_s}{\partial x} + S_{fx} &= 0 \\ \frac{\partial Z_s}{\partial y} + S_{fy} &= 0 \end{aligned}$$

$$\text{avec } S_{fx} = \frac{n_x^2}{\eta^{1/3}} \frac{(U^2 + V^2)^{1/2}}{\eta} U \text{ et } S_{fy} = \frac{n_y^2}{\eta^{1/3}} \frac{(U^2 + V^2)^{1/2}}{\eta} V$$

où  $n_x$  et  $n_y$  sont les coefficients de frottement de **Manning** (en  $m^{-1/3}.s$ ) dans les directions  $x$  et  $y$ , supposées directions principales d'anisotropie pour ces coefficients. Ce sont ces dernières équations qui sont résolues par BIGFLOW.

#### ▪ Application

Nous simulons avec BIGFLOW l'**écoulement 1D** dans un canal de **pen**te **I = -0.001**, de section et de coefficient de rugosité **n = 0.001** uniformes, d'extension longitudinale **L = 2000 m** et limité en amont et en aval par deux réservoirs de hauteurs respectives  **$\eta_0 = 10$  m** et  **$\eta_L = 5$  m**.

Initialement, un "barrage" partage pratiquement le domaine en deux (situé en  $X = 1025$  m): le niveau est à 10 m en amont, et de 5 m en aval. Pour  $t > 0$ , le "barrage" est "rompu". Nous avons réalisé la simulation jusqu'à  $t = 3$  s. Les temps de sortie sont 0.01, 0.05, 0.1, 0.5, 1 et 3 unités de temps (s).

La taille des mailles choisie est de 12.5 m (domaine de 161 noeuds selon la direction X).

Voici pour exemple, la structure du fichier d'entrée principal utilisé par BIGFLOW 2000 :

FICHIER INPUT1 DU TEST « RUPTURE DIGUE 1D » (BIGFLOW 2000)

```

IDATE (DAY-MONTH-YEAR):
091098
IDRUN (SIMULATION ID NUMBER):
109801
LRUN (0:TEST RUN/1:FULL RUN):
1

NGRID1,2,3 (FULL GRID SIZE: TOTAL No.of NODES):
161 3 3
MESH SIZE DX1,DX2,DX3:
12.5000000000 1.0000000000 1.0000000000
GRAV1,2,3 (GRAVITY VECTOR, DEFINES AXES):
-0.001000000E+00 0.000000000E+00 0.000000000E+00
TYPE OF BNDRY CONDITIONS: LTYPA(j),LTYPB(j),j=1,2,3:
1 1
2 2
2 2
Boundary conditions:(FIXAj,FIXBj)j=1,2,3:
10E+00 5E+00
0.000000000E+00 0.000000000E+00
0.000000000E+00 0.000000000E+00
LHIN (0:Hin UNIFORM, 1:Hin NONUNIFORM):
1
HIN (INITIAL OR REFERENCE HEAD VALUE):
10

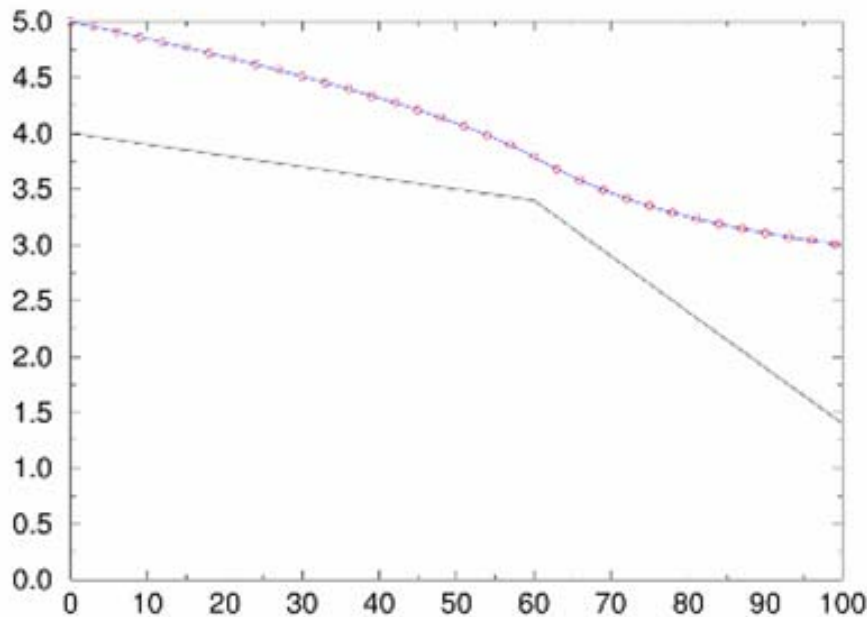
FLOW REGIME: SATURATED/UNSATURATED (LFLOW=1/2):
2
TRANSIENT/STEADY FLOW (LTRANS=1/0):
1
DELTA,GAMMA (TERMS OF WARD HEAD DROP LAW):
0.000000000 1.000000000E+00

ISOTROPIC/ANISOTROPIC CONDUCTIVITY (LKANIS=0/1,2):
0
Ksat_11(x) in K_11(h): VALUE & STATISTICS (FKGM,FKDEV):
0.001 0.000000000E+00
Ksat_22(x) in K_22(h): VALUE & STATISTICS (FKGM,FKDEV):
0.001 0.000000000E+00
Ksat_33(x) in K_33(h): VALUE & STATISTICS (FKGM,FKDEV):
0.001 0.000000000E+00
Ss(x) or So in K(h) or T(h): VALUE & STATS (CAPGM,CAPDEV):
0.000000000E+00 0.000000000E+00

```

---

COEFF TTsat(x) in T(h): VALUE & STATS (TTGM,TTDEV):  
 1.0000000000 0.0000000000E+00  
 COEFF ALFA(x) in K(h) or T(h): VALUE & STATS (ALFGM,ALFDEV):  
 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00  
 COEFF BETA(x) in K(h) or Th(h): VALUE & STATS (BTGM,BTDEV):  
 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00  
 COEFF HBB(x) in K(h) or Th(h): VALUE & STATS (HBBGM,HBBDEV):  
 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00  
 K(h) or T(h) Cstant Coeff: VGN:  
 0.0000000000E+00  
 K(h) Cstant Coeff: FKDRY :  
 0.0000000000E+00  
 T(h) Cstant Coeff: TTDRY:  
 0.0000000000E+00  
 TIME STEP (DTIN,DTMIN,DTMAX,DTMUL):  
 0.9999999776E-03 0.9999999776E-04 1.00000 1.100000048  
 DHSTAB (TYPICAL HEAD DIFFERENCE FOR T-STEP CONTROL):  
 0.0000000000E+00  
 ERMIN (ERROR NORMS/INNER ITER: E<ERMIN-->CONV):  
 0.0000010000E+00  
 ITEND (MAX. NUMBER OF LINEAR SOLVER ITERATIONS):  
 100  
 ENLHA,ENLHR,ENLTA (ERR. NORM/OUTER ITER: E<ENL->CONV):  
 0.5000000047E-03 0.0000000000E+00 0.0000000000E+00  
 INLMAX (MAX.No.NONLINEAR OUTER ITERATIONS):  
 20  
 LFLUP (FLUX UPDATING SCHEME):  
 0  
 LKWNOD=1,2,3,4 (MIDNOD.KSAT:GEOM,HARMON,ARITHM MEAN,MAX):  
 1  
 MACHINE DEPENDENT CSTANTS: SRELPR,RSMALL:  
 0.9999999975E-06 0.9999665841E-41  
 KTMAX (MAX. OR TOTAL NUMBER OF TIME STEPS):  
 0  
 TYMAX (MAX. OR TOTAL TIME OF TRANSIENT SIMULATION):  
 3.  
 LTOUT (OPTION FOR OUTPUTS AT GIVEN TIMES):  
 1  
 KTOUT (NUMBER OF EARLY OUTPUT TIMES):  
 2  
 EARLY OUTPUT TIMES TYMOUT(1),...,TYMOUT(ktout):  
 0.01 0.05 0.10 0.50 1.00 3.00  
 SAVE 3-D T(x) AND K(x) along with h(x) (LTHETOUT=0/1):  
 0  
 SAVE 3-D mid nodal fluxes along with h(x) (LMIFLUX=0/1):  
 0  
 OUTPUTS OPTIONS KOUT11,KOUT12:  
 20 10 5  
 LOCATION OF NODE/LINE/PLANE FOR THE PROBE (IPROBj):  
 0 0 0  
 SPECIAL OPTIONS LBFLUX,LMASS,LIFLUX:  
 1 0 0  
 ACTUAL NAMES OF ALL INPUT FILES (INPUT1/.../INPUT9):  
 INPUT1  
 INPUT2  
 INPUT3  
 INPUT4  
 INPUT51  
 INPUT52  
 INPUT53  
 INPUT6  
 INPUT7  
 INPUT8  
 INPUT9



**Fig.5.4** Résultats du problème de rupture de digue : simulation BIGFLOW ( - ) et solution analytique (  $\circ$  ) (Ababou *et* Trégarot 2000).

## V - 4.2 Ecoulements couplés en géométrie simplifiée

Les tests suivants ont pour objectif de prouver la capacité du modèle numérique à résoudre des problèmes couplés : vérification du bilan de masse, convergence, et comportement physique de la surface libre rivière nappe.

### V - 4.2.1 Plaine et rivière rectiligne 70 km $\times$ 4 km

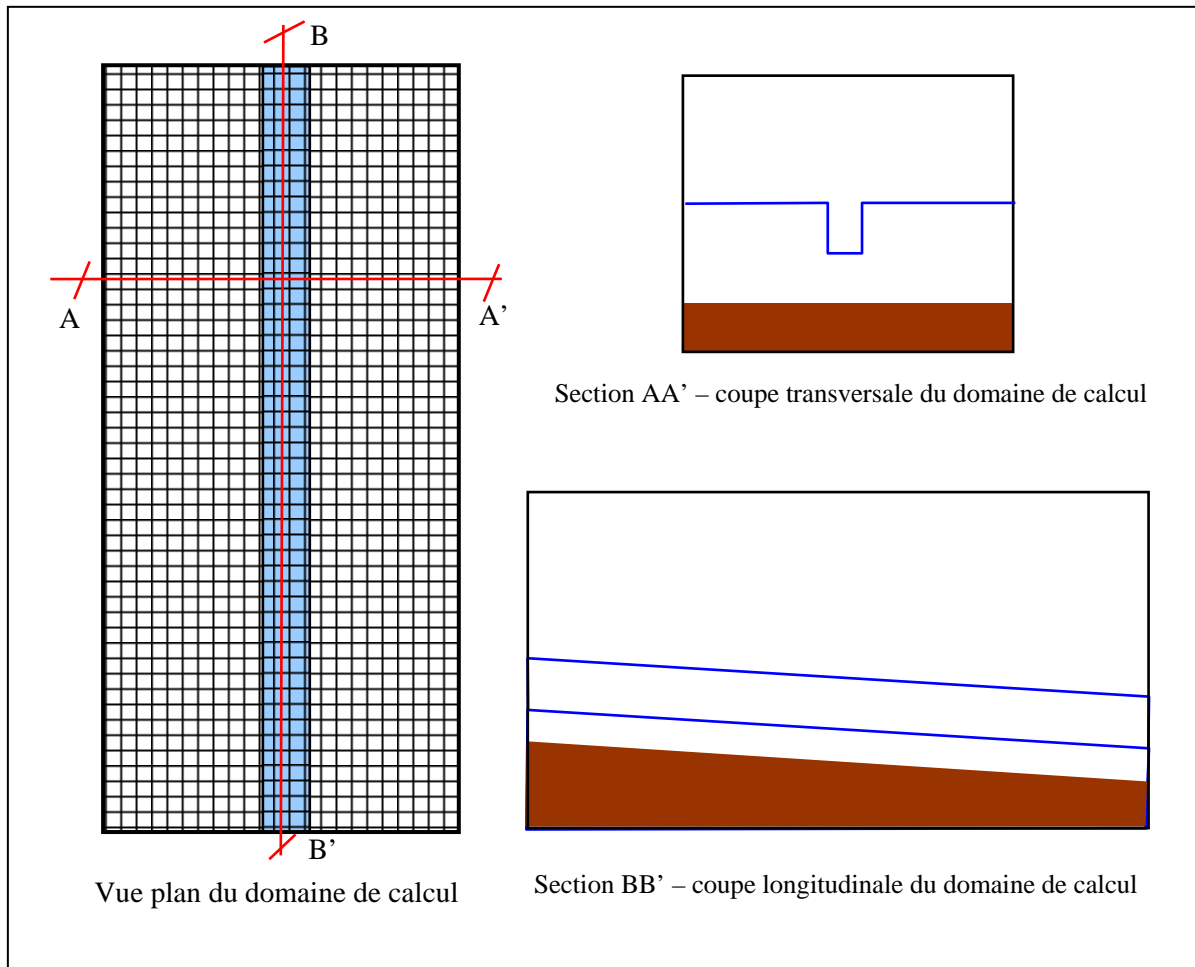
Il s'agit, dans cette étape préliminaire, de faire une modélisation très simplifiée (qualitative) de l'écoulement couplé rivière- nappe de la Garonne avec son lit majeur et sa nappe d'accompagnement (tronçon de 70 km  $\times$  4 km environ) (voir figure 5.5).

Les objectifs de cette étape sont :

- de tester le comportement numérique du code (réglages du pas de temps, convergence des itérations, bilans de masse et débogages éventuels du couplage nappe-rivière)
- de vérifier qualitativement les effets de différents types de conditions limites et de la paramétrisation des propriétés hydrauliques (nappe : perméabilité ; rivière : Manning)

La géométrie très simple du domaine est un rectangle traversé un tronçon linéaire de rivière au milieu du domaine. La grille du domaine est rectangulaire et régulière. La section de la rivière est rectangulaire en U. La discrétisation du domaine est la suivante :

- $L_x = 4$  km ;  $L_y = 70$  km ;
- $\Delta x = 25$  m ;  $\Delta y = 100$  m ;
- $N_x = 10$  ;  $N_y = 700$  (  $N_{\text{total}} = 112000$  nœuds.)



**Fig 5.5** Configuration du problème test du modèle de couplage surface/souterrain.

Le dénivelé axial (suivant y) de la surface du sol  $Z_{sup}$  et du lit de la rivière  $Z_{inf} = 70$  m.

Le gradient axial moyen (suivant y) de  $Z_{inf}$  et de  $Z_{sup}$  :

$$\text{grad}Z (\text{axial}) = 70\,000 \text{ m} / 70 \text{ m} = 1/1000.$$

On prend  $\text{grad}(Z_{inf}) = \text{grad}(Z_{sup}) = 0$  axialement (suivant y) :

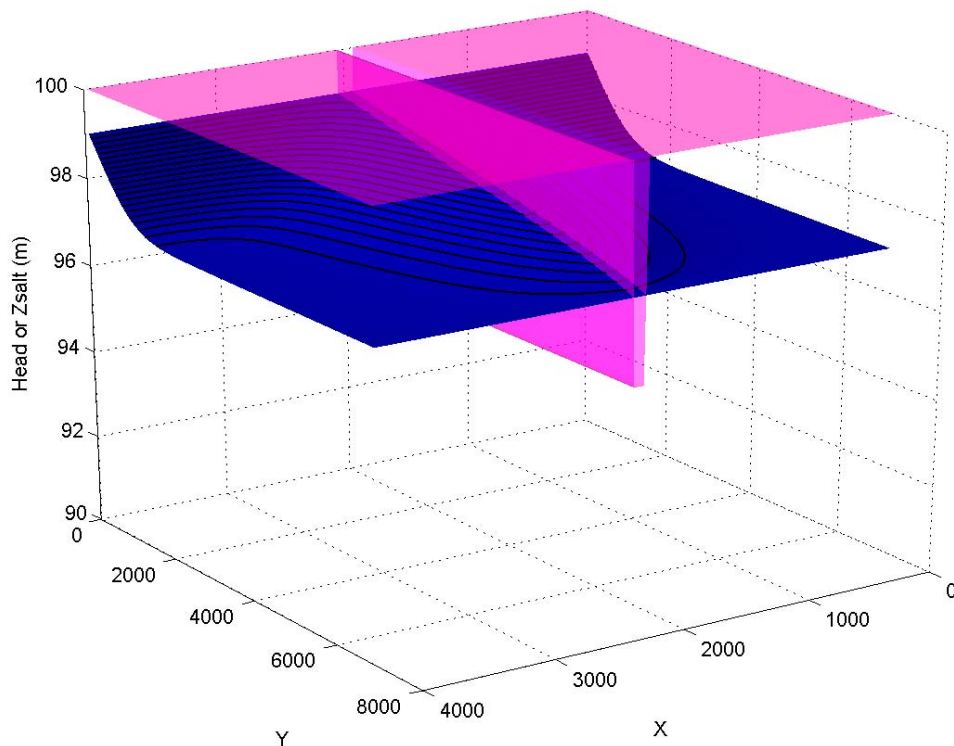
- $Z_{sup} = 100$  m
  - sauf dans la rivière où  $Z_{sup} = 95$  m (rivière en « U » de profondeur 5m)
- $Z_{inf} = 95$  m

Les conditions limites de cote piézométrique suffiront à produire un écoulement amont-aval :

- CL amont :  $H_{nappe} = H_{rivière} = 99$  m à l'amont (frontière  $y = 0$ )
- CL avale :  $H_{nappe} = H_{rivière} = 96$  m à l'aval (frontière  $y = L_y = 70\text{km}$ )
- CL latérales : Flux nuls sur les frontières  $x = 0$  et  $x = L_x$

Les conditions initiales :  $H_{init} = 96\text{m}$  partout

La figure 5.6 montre les résultats numériques de la simulation couplée surface/souterrain. On remarque qualitativement que l'eau s'écoule plus rapidement dans la rivière que dans l'aquifère. De plus on remarque l'alimentation de la nappe par la rivière.



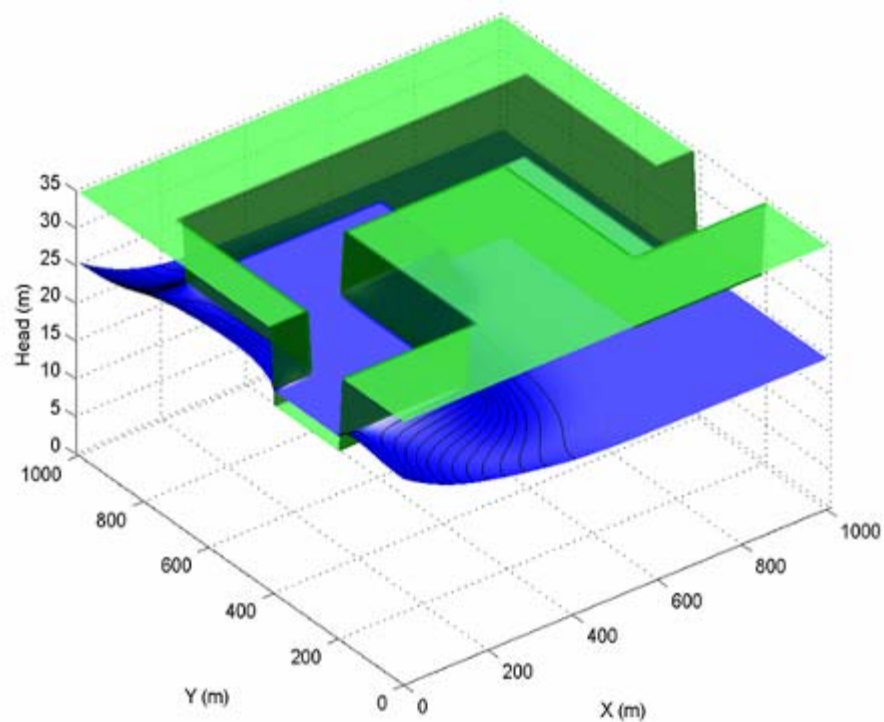
**Fig. 5.6** Résultats numériques d'une simulation couplée surface/souterrain avec le code BIGFLOW.

#### V - 4.2.2 Série de tests couplés avec méandres en « U »

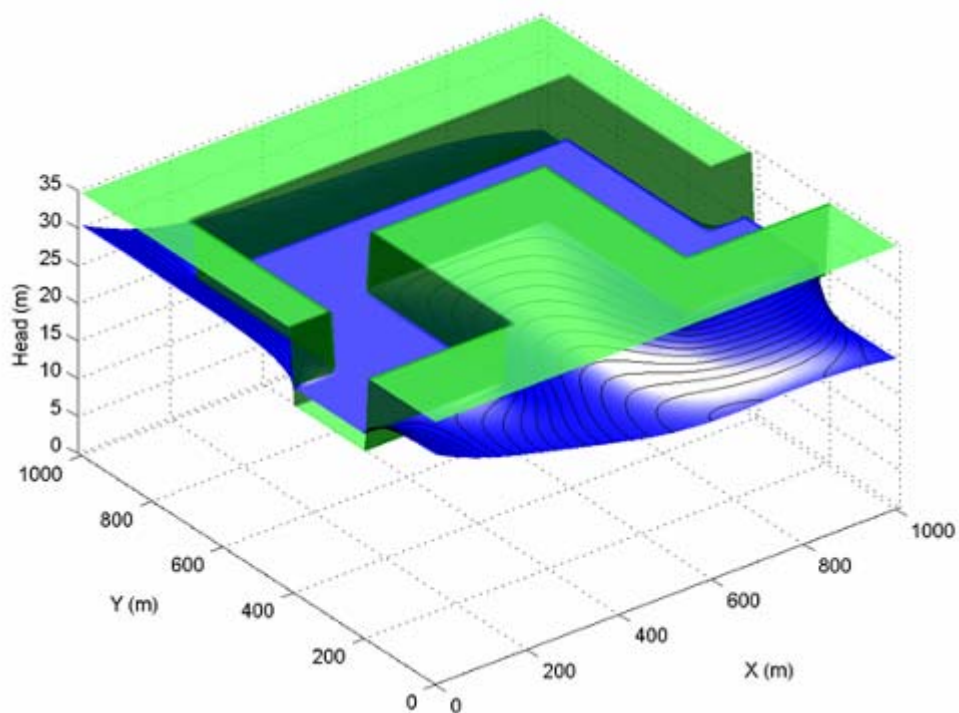
Une autre série de tests de simulation, comme celle de la figure 5.7 a été effectuée. Ces tests concernent des configurations extrêmement simplifiées en 2D, mais avec couplage surface souterrain et surface souterrain en présence d'intrusion saline. Vu le manque de solutions analytiques pour le couplage surface souterrain, les résultats sont validés par comparaison qualitative et par inspection de la conservation de masse.

L'exemple de la figure 5.7 et 5.8 concerne le passage d'une inondation dans un système couplé rivière/aquifère dans un méandre. Dans cet exemple on voit l'avancement de l'eau dans la cours d'eau et l'échange avec le milieu poreux. On remarque à partir des contours dans le méandre de la figure 5.8 la circulation de l'eau à travers le méandre. Ce type de comportement peut expliquer la mobilisation et le transport d'un polluant par les cours d'eau au niveau des méandres.

Les figures 5.9 et 5.10 présentent le même exemple mais avec de l'intrusion saline. On remarque dans la figure 5.10 que l'intrusion saline est accentuée au niveau de l'exutoire de la cours d'eau.

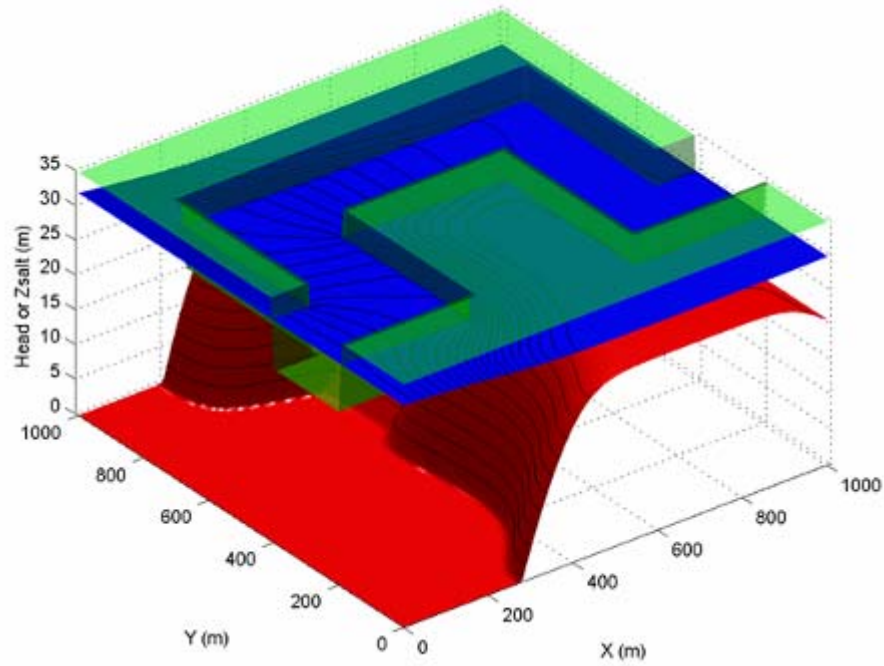


**Fig. 5.7** Simulation transitoire simplifiée rivière/aquifère avec le modèle couplé 2D plan de BIGFLOW (méandre rectangulaire sans pente) ( $t=45s$ ).

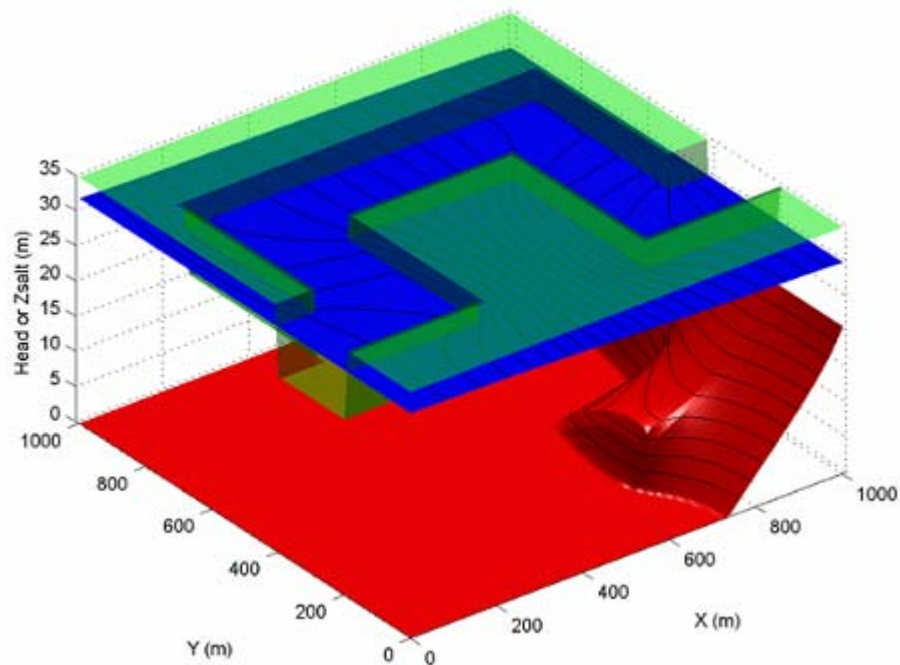


**Fig. 5.8** Simulation transitoire simplifiée rivière/aquifère avec le modèle couplé 2D plan de BIGFLOW (méandre rectangulaire sans pente) ( $t=100s$ ).





**Fig. 5.9.** Simulation transitoire simplifié rivière/aquifère en présence d'intrusion saline avec le model couplé 2D plan de BIGFLOW (méandre rectangulaire sans pente) ( $t=45s$ ).



**Fig. 5.10** Simulation transitoire simplifiée rivière/aquifère en présence d'intrusion saline avec le model couplé 2D plan de BIGFLOW (méandre rectangulaire sans pente) ( $t=100s$ ).

## V - 5 GENERATION D'UN MODELE NUMERIQUE DE TERRAIN INTEGRE (GARONNE)

### V - 5.1 Introduction

Cette section décrit un travail d'estimation, interpolation spatiale et fusion de données en vue de la reconstruction de la topographie et/ou bathymétrie des surfaces (sol, lit de rivière, substratum) à partir de données analogiques et numériques. Les données utilisées incluent : cartes géographiques de l'IGN, Modèle Numérique de Terrain du bassin de la Garonne (pixels 100mx100m), profils en travers le long de la Garonne, etc.

Le résultat, appelé MNT « intégré », est une grille de pixels haute résolution (10mx10m à 20mx20m).

Nous disposons des données suivantes fournies par le LEH (Laboratoire de l'Ecologie des Hydrosystèmes) (voir figure 5.11) :

- le tracé de la ligne centrale de la rivière de la Garonne (données vectorielles Polygones (x,y)) ;
- le tracé des berges des rivières (données vectorielles Polygones (x,y)) ;
- les profils en travers de la rivière (type points X, Y et Z);
- le MNT (Modèle Numérique de Terrain) d'une résolution de 100m;
- un ensemble de points IGN (X,Y,Z).

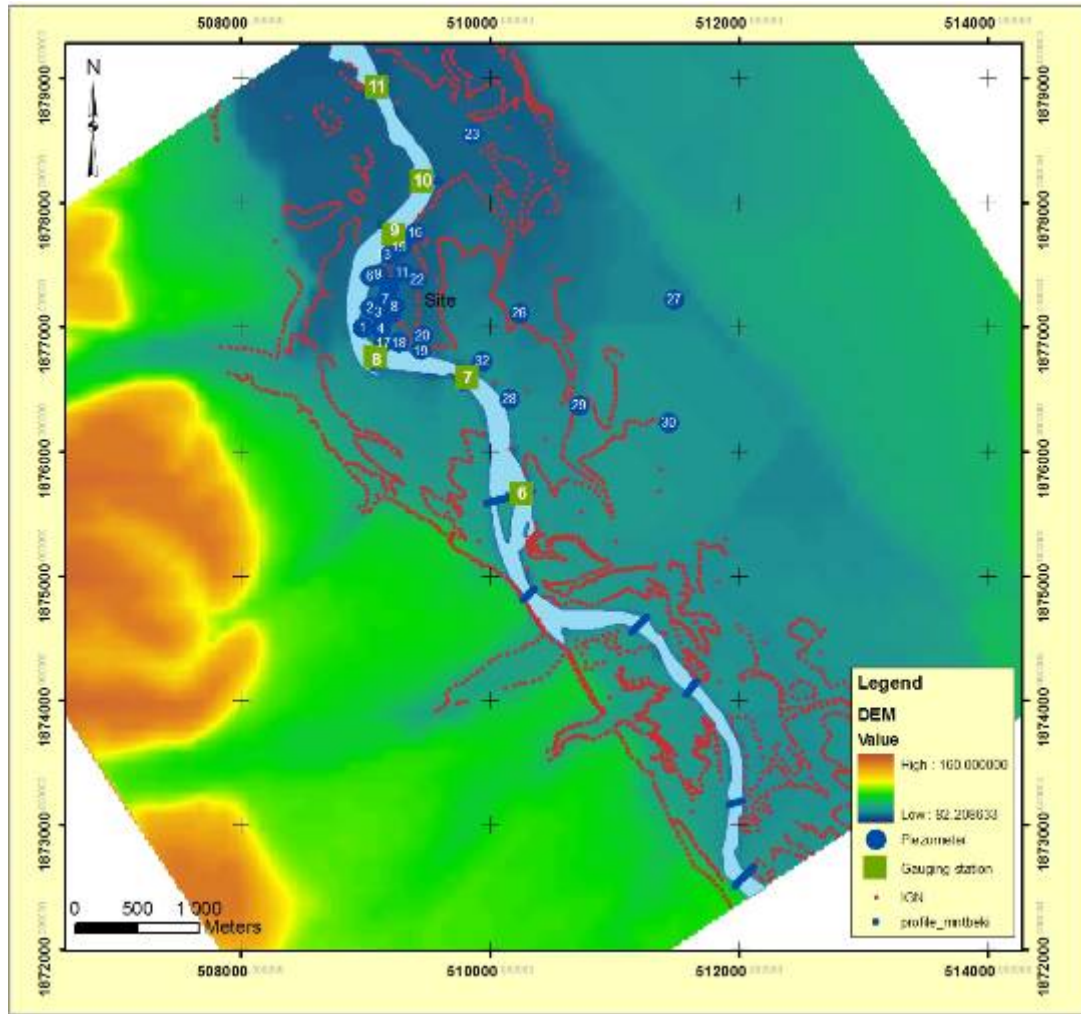
### V - 5.2 Méthode Géostatistique

L'interpolation spatiale en géostatistiques est le problème d'estimation d'une fonction  $F(x)$ , où  $x = (x,y)$ , en un point  $x_p$  du plan à partir de valeurs connues de  $F$  en un certain nombre,  $m$ , de points environnants  $x_i$  :

$$F(x_p) = \sum_{i=1}^m W_i F(x_i) \quad (5.102)$$

avec  $W_i$  coefficients de pondération.

Les coefficients  $W_i$  peuvent être déterminés par plusieurs méthodes. On peut procéder à l'interpolation linéaire (en fonction de l'inverse de la distance), ou à la méthode des splines cubiques (ajustement de polynômes cubiques). Le krigeage choisit plutôt les poids à partir du degré de similarité entre les valeurs  $F$ , estimé à partir de la covariance entre les points en fonction de la distance entre ces points (Gratton 2002).



**Fig. 5.11** Représentation des données disponibles dans la base de données SIG de la Garonne au niveau de Montbéli.

### V - 5.2.1 Krigeage

Le krigeage consiste à calculer les coefficients  $W_i$  de la fonction  $F$  à l'aide des valeurs du variogramme. L'hypothèse principale indispensable pour utiliser le krigeage est que la moyenne  $\mu$  et la variance  $Var$  de la fonction  $F$  soient stationnaires, donc qu'elles ne dépendent pas de la position des points, mais seulement de la distance entre les points.

$$\mu(x) = E\{Z(x)\} \quad (5.103)$$

$$Var\{Z(x)\} = E\{[Z(x) - \mu(x)]^2\} \quad (5.104)$$

Cette hypothèse est applicable dans le cas où les structures qu'on mesure présentent une forme assez régulière.

### V - 5.2.2 Estimation du variogramme

L'aspect central dans toutes les études géostatistiques est l'estimation du variogramme. Le variogramme est la variance totale moins la covariance en fonction de la distance entre les points. Le krigeage utilise le semi-variogramme pour déterminer les poids dans l'(5.102). Pour  $n(h)$  points,  $x_i$  et  $y_i$  séparés par la distance  $h = |x_i - y_i|$ , le semi variogramme est donné par la valeur :

$$\gamma(h) = \frac{1}{2n(h)} \sum_{i=1}^{n(h)} (x_i - y_i)^2 \quad (5.105)$$

A l'aide de la méthode des moindres carrés, une fonction est ajustée sur les valeurs expérimentales du semi-variogramme. On obtient ainsi la fonction du semi-variogramme. Le choix et l'ajustement de la fonction au semi variogramme constituent la partie délicate du krigeage (Gratton, 2002).

### V - 5.2.3 Type de krigeage

Il existe trois types de krigeage à une variable (Gratton, 2002) :

- krigeage simple : variable stationnaire de moyenne connue ;
- krigeage ordinaire : variable stationnaire de moyenne inconnue ;
- krigeage universel : variable non stationnaire.

### V - 5.2.4 Krigeage ordinaire ou ponctuel

Le but est de trouver les coefficients  $W_i$  qui donnent une valeur du semi-variogramme calculé à partir de  $x_p$  égale au semi-variogramme ajusté. La méthode consiste à multiplier les  $W_i$  de chacun des points par la semi-variance de ce point.

$$A.W = B \quad (5.106)$$

avec A matrice des variances  $\gamma(h_{ij})$  calculées à partir des valeurs mesurées ;

B vecteur des variances  $\gamma(h_{ip})$  calculées à partir de la fonction ajustée ;

W vecteur des coefficients de pondération.

Une variable libre  $\lambda$  est introduite pour vérifier la condition sur la somme des coefficients qui doit être égale à 1.

L'erreur standard en chaque point est obtenue par :

$$s_p = W^T . B \quad (5.107)$$

### V - 5.2.5 Propriétés du krigeage

Les propriétés et caractéristiques principales associées au krigeage sont (Marcotte, 2003):  
Les propriétés et caractéristiques principales associées au krigeage sont (Marcotte, 2003):

- Le krigeage est une interpolation linéaire, sans biais, à variance minimale, par construction.
- C'est un interpolateur exact : si l'on estime un point connu, on retrouve la valeur connue.
- Il présente un effet d'écran : les points les plus près reçoivent les poids les plus importants. Cet effet d'écran varie selon la configuration et selon le modèle de variogramme utilisé pour le krigeage. Plus l'effet de pépité est important, moins il y a d'effet d'écran.
- Il tient compte de la taille du champ à estimer et de la position des points entre eux.
- Par l'utilisation du variogramme, il tient compte de la continuité du phénomène étudié (effet de pépité, anisotropie, etc.).
- le krigeage effectue généralement un lissage, i.e. les estimations sont moins variables que les teneurs réelles que l'on cherche à estimer.
- Il est presque sans biais conditionnel. Ceci signifie que lorsqu'on applique une teneur de coupure à des valeurs estimées, on récupérera approximativement la teneur prévue. C'est une propriété très importante pour les mines. Cette propriété implique que l'estimateur utilisé soit plus lisse que la valeur qu'il cherche à estimer, ce qui est le cas pour le krigeage.
- Si l'on observe en un point une valeur coïncidant avec la valeur krigée pour ce point, alors les valeurs krigées en d'autres points ne sont pas modifiées par l'inclusion de ce nouveau point dans les krigeages. Par contre les variances de krigeage, elles, sont diminuées. De même, si l'on krige un certain nombre de points et que l'on utilise les valeurs krigées

comme si c'étaient de nouvelles données, alors les krigeages subséquents ne s'en trouvent pas modifiés (sauf pour la variance de krigeage).

### V - 5.3 MINT : Modèle Numérique Intégré de Terrain

Afin de séparer les domaines d'écoulement souterrain et de l'écoulement en surface, une description détaillée de la surface de séparation à l'échelle des mailles de calcul est nécessaire. Une construction intégrée du modèle numérique du terrain MINT s'impose. La construction du MINT à partir des données disponibles par les méthodes géostatistiques classiques comme la triangulation ou le krigeage ne donne pas de résultats satisfaisants car ces méthodes ne peuvent pas prendre en compte l'anisotropie spatiale du MINT dans la zone de la rivière. En fait le krigeage prend en compte la fonction de corrélation ou le semi-variogramme en fonction de la distance de séparation. Pratiquement la valeur en un point X va dépendre des valeurs d'un ensemble de points E choisis à une certaine distance de X (dans un rayon  $r$  pour la semi-variogramme sphérique).

Lorsque les profils sont loin l'un de l'autre et que le tracé de la rivière présente des courbures prononcées, il est nécessaire d'ajouter plus d'informations dans la zone de la rivière. Merwade et al. (2006) présente une solution dans le cas où des informations 3D sont disponibles tout au long de la rivière. Mais il est rare de disposer de cette information, surtout à l'intérieur de la rivière. Pour palier à ce problème on propose une interpolation des profils à l'intérieur de la rivière. Afin d'effectuer cette interpolation, on transforme le système de coordonnées cartésien  $(x,y)$  en un système de coordonnées curvilignes  $(\tau,n)$  qui suit la ligne centrale de la rivière. Ce calcul consiste à discrétiser la ligne centrale entre deux profils en  $N$  segments et d'interpoler entre ces deux profils. Les coordonnées du point central de chaque tronçon sont données par :

$$\tau_i = d_i \cos(\alpha_i) \text{ et } n_i = 0 \quad (5.108)$$

avec  $d$  la distance entre deux profils ;

$\alpha$  l'angle entre la ligne centrale et l'horizontale.

$$d_i = \sqrt{(x_i - x_{i-1})^2 + (y_i - y_{i-1})^2} \text{ et } \tan(\alpha_i) = \frac{(y_i - y_{i-1})}{(x_i - x_{i-1})} \quad (5.109)$$

L'orientation de chaque profil par rapport à l'horizontal est obtenue en interpolant linéairement l'angle  $\beta$  suivant l'axe  $\tau$  :

$$\beta_i = \beta_1 + \frac{d_i}{d}(\beta_2 - \beta_1) \quad (5.110)$$

où  $\beta_{1,2}$  est l'angle entre l'horizontale et le profil mesuré  $P_1, P_2$  définis.

par  $\tan(\beta_{1,2}) = \frac{(y_{B1,2} - y_{A1,2})}{(x_{B1,2} - x_{A1,2})}$  avec A et B sont les points extrêmes de chaque profil. La position

sur l'axe  $n$  de chaque point des profils interpolés est donnée par :

$$\tau_{ij} = \tau_i = d_i \cos(\alpha_i) \text{ et } n_{ij} = P_{ij} \cos\left(\frac{\pi}{2} - \alpha_i - \beta_i\right)^{-1} \quad (5.111) \text{ et } (5.112)$$

avec  $l_{ij} = \sqrt{(x_{ij} - x_{ci})^2 + (y_{ij} - y_{ci})^2}$  la distance entre le centre et un point du profil

L'interpolation entre deux lignes sera effectuée de façon linéaire entre deux profils. La distance entre les deux profils est donnée par  $d \approx \sum_{i=1}^N d_i$ . Plusieurs paires de points sont considérées entre les deux profils. Les paires de points suivantes sont reliées automatiquement entre deux profils :

- les points de centre ;
- la rive gauche du lit majeur ;
- la rive gauche du lit mineur ;
- la rive droite du lit majeur ;
- la rive droite du lit mineur.

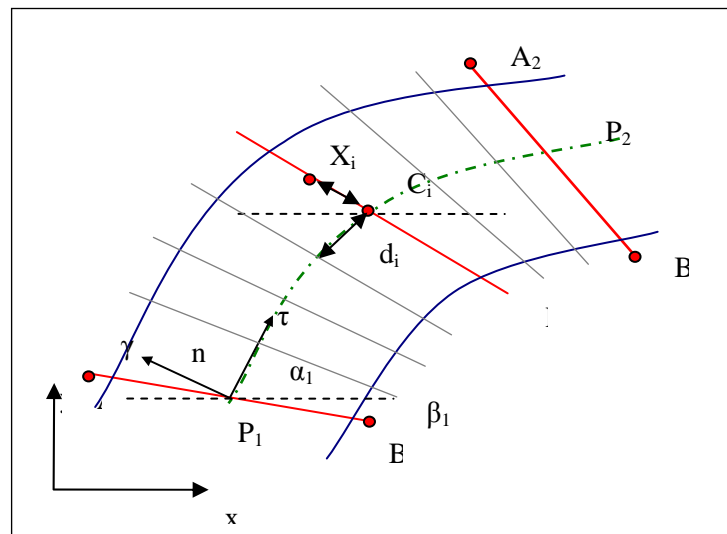
L'élévation du fond de rivière sur tous les profils intermédiaires et pour chaque paire de points est calculée avec la formule suivante :

$$Z_{ij} = Z_{1j} + \frac{d_i}{d} (Z_{2j} - Z_{1j}) \quad (5.113)$$

Le calcul des coordonnées (x,y) à partir des coordonnées (t,n) pour les points interpolés se fait à partir des formules suivantes :

$$X_{i_j} = Xc_i + l_{ij} \cos(\beta_i) = X_{i-1} + d_i \cos(\alpha_i) + l_{ij} \cos(\beta_i) \quad (5.114)$$

$$Y_{ij} = Y_{ci} + l_{ij} \sin(\beta_i) = Y_{i-1} + d_i \cos(\alpha_i) + l_{ij} \cos(\beta_i) \quad (5.115)$$



**Fig. 5.12** Transformation des coordonnées cartésiennes en coordonnées curvilignes

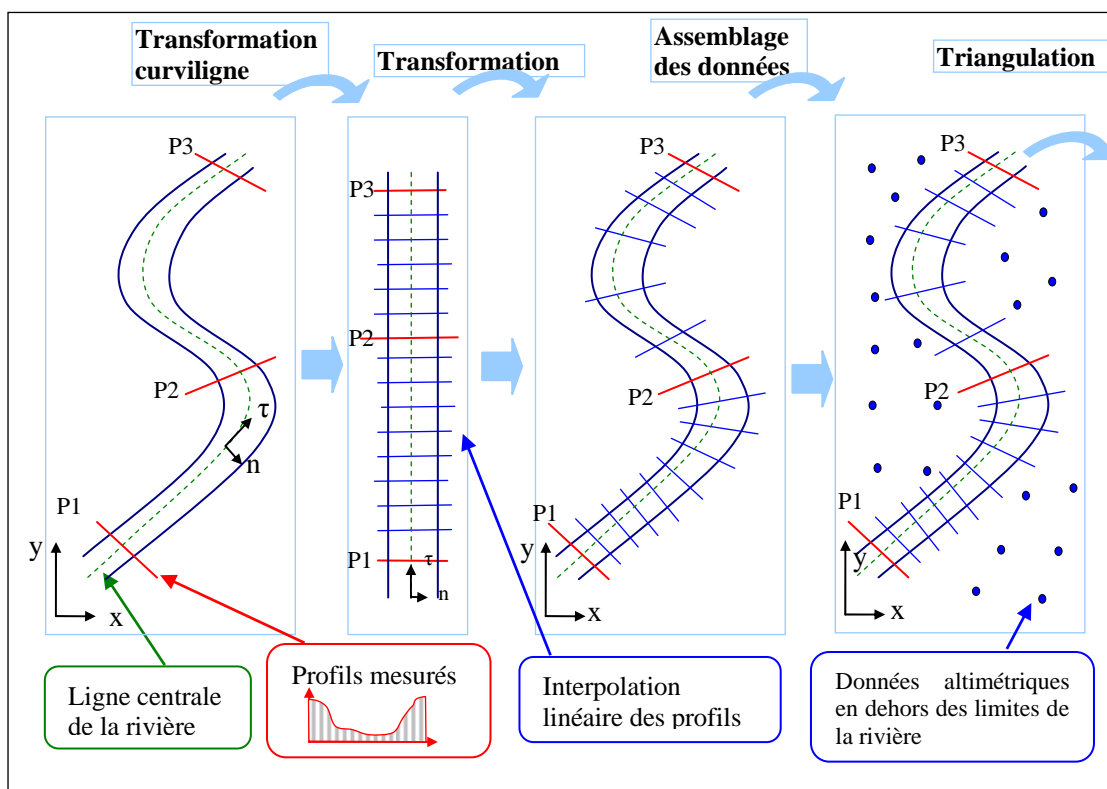
## V - 5.4 Méthodologie pour la construction d'un MINT

L'interpolation des profils sera effectuée dans un repère curviligne puis elle sera transformée vers le repère cartésien (x,y).

La méthode est décrite par les étapes suivantes :

1. **Analyse préliminaire:** Cette étape consiste à projeter toutes les données dans un seul système de référence géographique ; dans cette étude l'IGN Lambert II étendue est choisi. Ensuite la cohérence des profils est testée par rapport au tracé de la rivière et par rapport au niveau de la surface MNT. Ce type d'analyse a permis de détecter quelque anomalie dans les données du MNT 100x100 près de la rivière (dans une zone de 300 m de la rivière) et d'utiliser seulement les points IGN. Les données MNT seront utilisées pour l'estimation loin de la rivière.
2. **Transformation curviligne :** La rivière est discrétisée en plusieurs segments. Pour chaque point initial, l'angle  $\alpha$  avec l'axe OX et la longueur sont stockés. Les coordonnées dans le système curviligne sont ainsi obtenues à partir des longueurs des tronçons.
3. **Interpolation linéaire dans le repère ( $\tau$ ,  $n$ ):** une interpolation linéaire du niveau vertical par rapport à la distance de séparation est appliquée dans chaque tronçon entre deux profils. Cette interpolation est effectuée en considérant comme référence la ligne centrale, les berges du lit mineur, et le lit majeur. Cette interpolation peut être faite dans l'outil HEC-RAS mais avec les coordonnées curvilignes.
4. **Transformation inverse (back-transform) :** les nouveaux profils ainsi obtenus sont re-transformés dans les coordonnées (X,Y) en utilisant le point d'origine et l'angle  $\alpha$ .
5. **Interpolation de la zone rivière.**

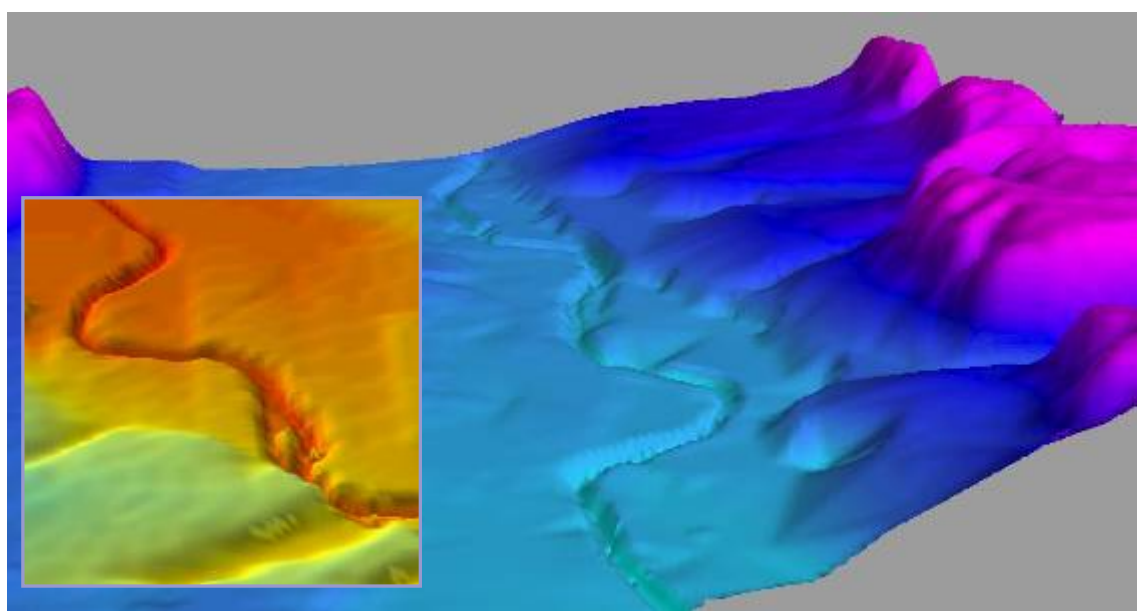
6. **Interpolation intégrée sur la zone complète** : finalement les données regroupées dans l'étape (1) sont associées aux données obtenues par l'interpolation à l'étape 5. Une dernière interpolation permet d'obtenir le MINT (voir figure 5.13).



**Fig. 5.13** Méthodologie pour l'obtention du MINT.

### V - 5.5 Construction du MINT pour la Garonne

Après traitement de ces données, sous le système d'information géographique (SIG), nous avons obtenu le MINT final du site d'étude avec des pixels de 20×20 m (voir la figure 5.14). On remarque que la morphologie du fond de la rivière est bien reproduite.



**Fig. 5.14** Vue 3D du MINT du site de Monbéqui (à 40 Km de Toulouse) avec une résolution de 20×20 m (Al Bitar et al. , 2006).



## V - 6 SIMULATION COUPLEE DU SYSTEME NAPPE RIVIERE DE LA GARONNE (TOULOUSE-MOISSAC)

Le site d'étude est localisé sur la plaine de la Garonne à 40 Km en aval de Toulouse. La moyenne annuelle des précipitations est de 500 mm, le débit moyen annuel de la Garonne au niveau du site est de 200 m<sup>3</sup>/s, mais cette valeur varie entre 50 m<sup>3</sup>/s en périodes d'étiages à 4000 m<sup>3</sup>/s en période de crues (Weng et al. 2003).

Les autres données nécessaires, que nous avons introduites dans le code sont :

- Le coefficient de rugosité du lit du cours d'eau : Dans le tronçon d'étude, La Garonne coule en de nombreux endroits sur les molasses du substratum (Agence de l'eau de la Garonne, 1989) ;
- Le coefficient de Chezy Correspondant est de l'ordre de : 35 m<sup>1/2</sup>/s (Chow 1988) (Bedient 2002) ;
- Le substratum est considéré comme étant un plan horizontal ;
- La distribution de perméabilité du sol est prise de Weng et al. (2003).

Nous avons donné des conditions initiales nulles, c'est-à-dire qu'il n'y a pas d'eau ni dans la rivière ni dans le cours d'eau. Comme conditions aux limites, nous avons donné une hauteur d'eau constante au niveau de la rivière ( $H=5\text{m}$ ), et une condition en sortie libre, c'est-à-dire que le gradient de  $H$  est nul ( $\text{grad}(H)=0$ ), l'eau est évacuée seulement sous l'effet de la gravité.

Les valeurs de  $n$  pour la Garonne sont pris à partir de l'Atlas Hydraulique de la Garonne, (SMEPAG, Tome 1, Tronçon 4). La Garonne coule dans de nombreux endroits sur les molasses pendant les crues, ce qui correspond, dans la table donnant  $n$  en fonction de la nature du lit, à un cours d'eau naturel avec un lit sinueux dégagé, donc à un «  $n$  » de l'ordre de 0.04 SI.

### V - 6.1 Echanges rivière-aquifère dans la Garonne

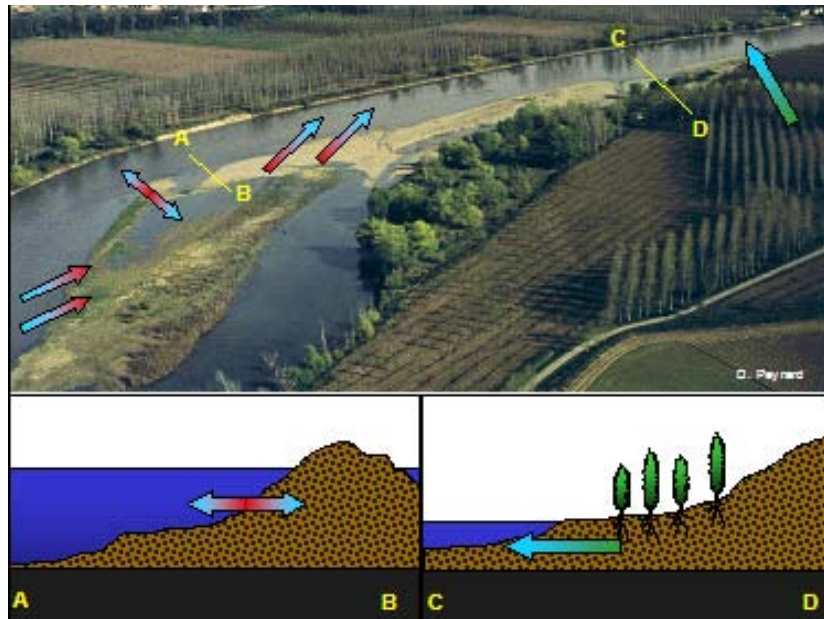
Cette modélisation s'inscrit dans le contexte d'une modélisation éco-hydrologique de la Garonne, qui a pour objectif de comprendre les échanges hydro-bio-géochimiques dans la zone humide de la Garonne. Plus précisément l'objectif principal est de quantifier – à l'aide de mesures in situ et de modélisations numériques - les interactions hydrauliques entre la rivière et la nappe d'accompagnement, et de voir leur effet sur le transport de masse (dans ce travail on s'intéresse à la modélisation hydraulique).

La figure 5.15 illustre schématiquement ces échanges dans une portion d'un méandre de la Garonne. Le méandre, montré en arrière-plan dans la photographie, est proche du village de Monbéqui. Il est inclus dans le domaine de calcul utilisé dans nos modélisations. La flèche dans la figure 5.15 montre les échanges d'eau et de soluté à travers la zone hyporhéique, les bancs de galets et les berges. Le schéma est adapté de Ababou, et al. (2006).

La zone d'étude est un domaine de 75 km de plaine alluviale de la Garonne, entre les villes de Toulouse et de Moissac (France). Les paramètres physiques du système rivière-aquifère sont explorés et utilisés pour analyser les échanges hyporhéiques d'eau et de leurs effets sur l'extraction biochimique. Dans ce contexte, il était nécessaire de faire une modélisation couplée rétro-active (couplage implicite) entre l'eau de surface et l'eau souterraine. Cette analyse aidera à quantifier les échanges entre les différents compartiments de l'hydrosystème.

La modélisation a été effectuée à l'échelle mésoscopique (tronçons de ~4-8 km). Le site est instrumenté avec 20 piézomètres. Les niveaux d'eau ont été enregistrés de façon continue tout au long de l'année 2005 et 2006, ainsi que les concentrations sur des espèces chimiques conservatives comme les chlorures dans des conditions hydrologiques diverse.





**Fig. 5.15** Représentation des interactions d'eau et de solutés dans un méandre de la Garonne (d'après Peyrard 2006).

Le lecteur est aiguillé vers Weng et al. (2003) concernant les données disponibles sur le site, et pour les résultats de modélisation de l'eau souterraine (non couplé) et pour la calibration effectuée. La calibration de la distribution de la conductivité hydraulique effectuée dans Weng et al. (2003) est utilisée dans cette étude.

## V - 6.2 Simulation couplée rivière-aquifère en 2D

Les figures 5.16, 5.17 et 5.18 montrent les résultats de simulations couplées du flux, effectuées en utilisant la topographie actuelle de la Garonne et de sa plaine alluviale à l'échelle du méandre. La topographie intégrée (MINT) du sol et du fond de la rivière est obtenue à partir de différentes sources, puis interpolées et fusionnées sur une seule grille (voir section V-5). Les données d'entrées et de sorties de simulation ont été organisées dans une base de données SIG (Système d'Information Géographique).

Les simulations du flux sont montrées en vue plane aux temps (1h, 2h, 3h) et en perspective au temps (2h) dans la figure 5.19.

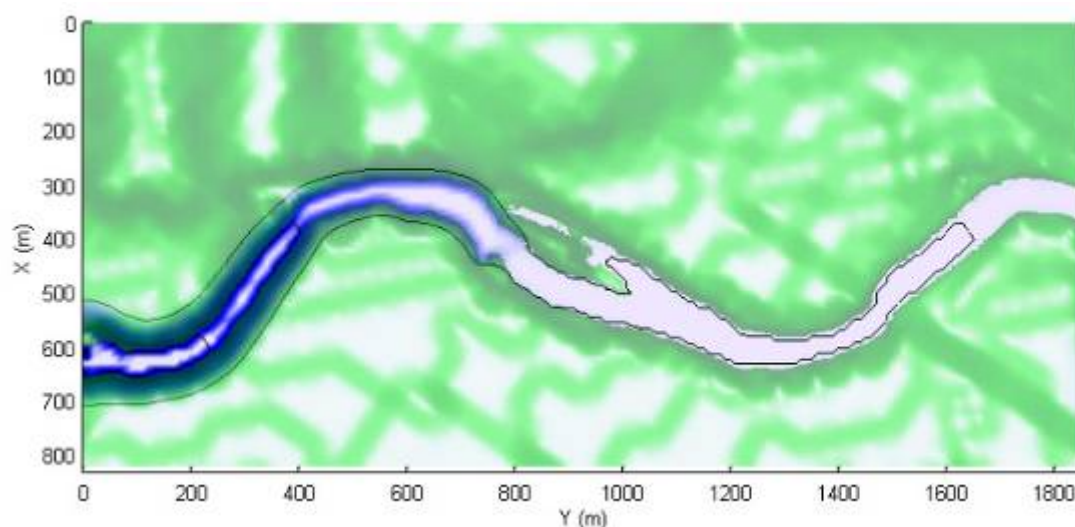
Il faut noter que le flux dans la rivière et dans la nappe d'accompagnement est forcée via une condition limite amont ; ce qui correspond à un événement de crue artificielle. Dans une étape ultérieure, des vraies mesures limnigraphiques seront utilisées pour forcer les événements de crue observés en amont. Des conditions limites transitoires à partir de séries de données temporelles seront utilisées facilement par le code d'écoulement existant.

De l'autre côté, en fonction des données et de l'échelle d'analyse on peut avoir un problème avec la condition limite en amont. Dans ce cas on aura besoin d'implémenter une condition limite transparente en amont.

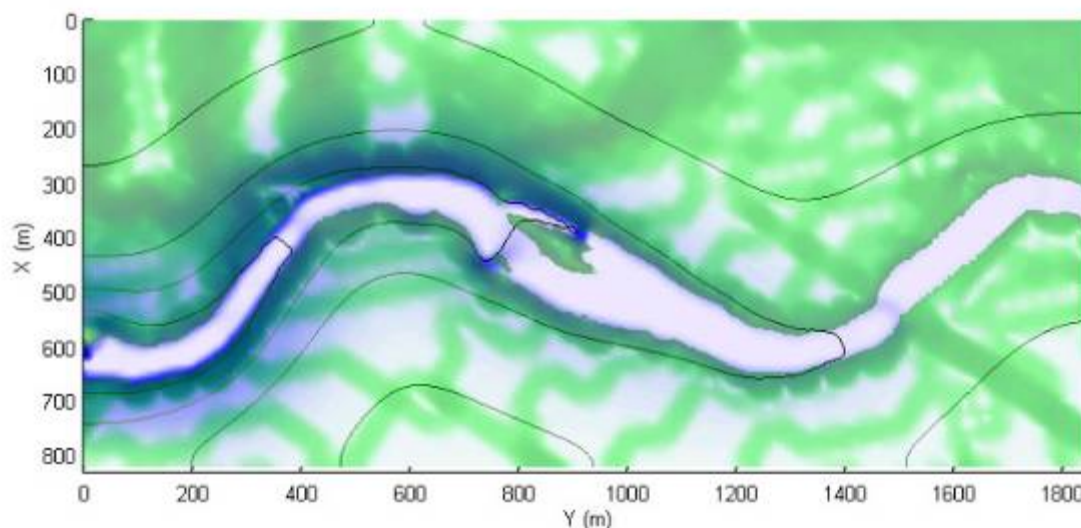
Une condition limite raisonnable serait d'imposer un gradient de la profondeur d'eau dans l'aquifère et dans la rivière égal à zéro (flux diffusif nul). Mais cette condition limite ne marchera que si le flux gravitationnel est significatif comparé au flux cinématique e.g., pente du fond de la rivière et du substratum significatif dans la direction de l'écoulement.

### V - 6.2.1 Résultats de la simulation

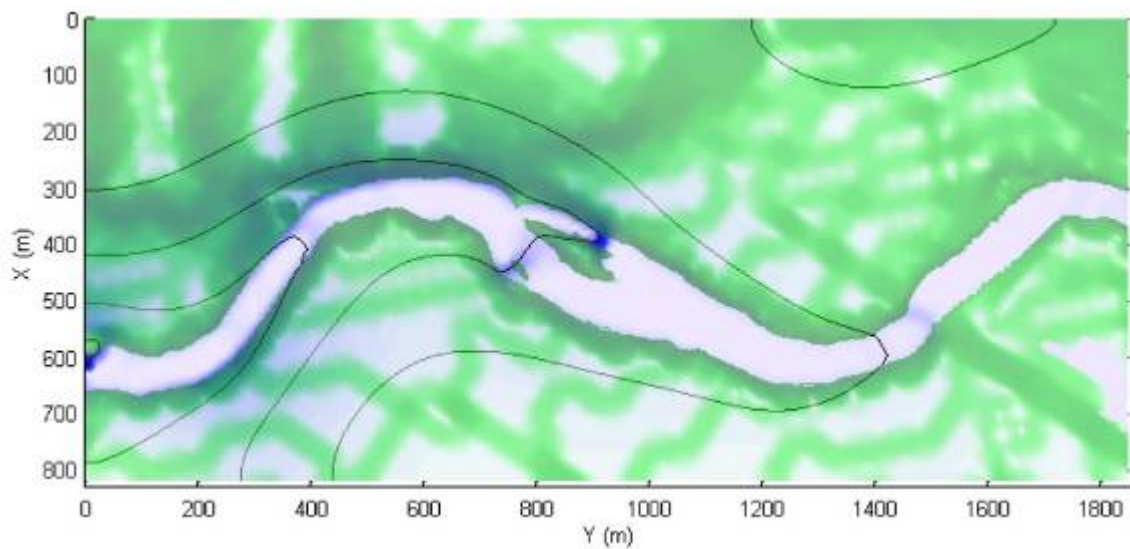
Nous avons simulé ce cas test, les résultats obtenus sont illustrés sur les figures 5.13, 5.14 et 5.15. Les trois figures nous permettent de distinguer les deux types d'écoulement : l'écoulement rapide dans le cours d'eau, et l'écoulement lent dans la nappe. Dans la figure 5.16, on remarque que l'eau s'écoule très rapidement dans le cours d'eau par rapport à la nappe. Dans la figure 5.17, le niveau piézométrique dans la nappe commence à s'élever et dans le cours d'eau l'eau continue à s'écouler. Dans la figure 5.17, au niveau du cours d'eau nous avons un régime permanent, cela se voit par le fait que les iso-valeurs n'évoluent pas entre les figures 5.16 et 5.17, dans la nappe le niveau piézométrique continue à s'élever.



**Fig.5.16** Les iso-valeurs de la surface libre au niveau du cours d'eau et de la nappe à  $t = t_1$ .

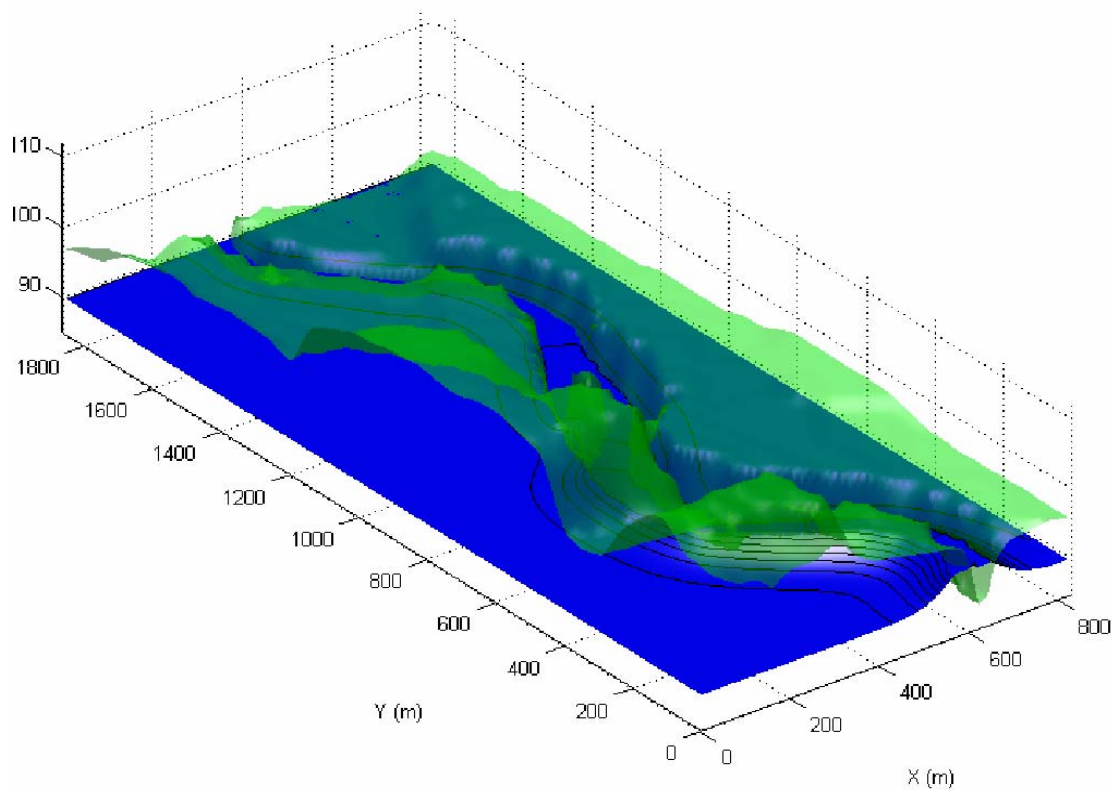


**Fig. 5.17** Les iso-valeurs de la surface libre au niveau du cours d'eau et de la nappe à  $t = t_3$ .



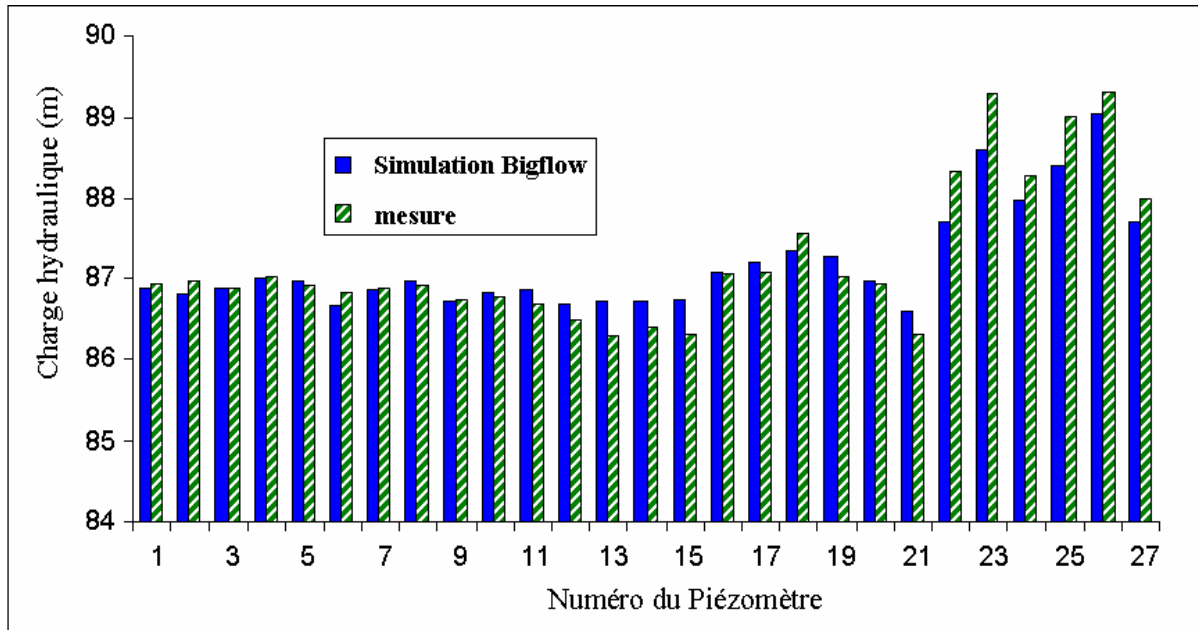
**Fig.5.18** Les iso-valeurs de la surface libre au niveau du cours d'eau et de la nappe à  $t = t_2$  (temps intermédiaire).

On remarque aussi que la taille du domaine d'écoulement de l'eau dans la rivière évolue de façon dynamique dans le temps. Cela est perceptible en comparant l'eau au niveau des bancs de galets entre les figures 5.16 à 5.17. Cette caractéristique rend le modèle spécialement adapté pour la modélisation des processus d'inondations lentes.



**Fig.5.19** Représentation en perspective des résultats de simulation du modèle couplé rivière-aquifère de la Garonne.

Dans la figure 5.20 les niveaux d'eau dans les piézomètres en régime permanent sont comparée aux niveau d'eau moyen annuel mesuré dans les piézomètres (1 à 27). On remarque une bonne correspondance entre les résultats sauf pour les piézomètres (23 et 26). Il est difficile d'expliquer la différence au niveau des piézomètres 23 et 26, mais on suppose que les paramètres de conductivité ne sont pas bien estimés.



**Fig.5.20** Comparaison des résultats du niveau d'eau en état permanent et du niveau d'eau moyen annuel dans les piézomètres (1 à 27).

## V - 7 CONCLUSIONS

Dans ce chapitre, on s'est intéressé aux interactions « surface/souterrain », en présence ou non de l'intrusion saline. Les équations d'écoulements plans (x,y) pour les eaux de surface sont développées avec les différentes simplifications possibles.

Ensuite une analogie est montrée entre les équations d'écoulement d'eau de surface et les équations d'écoulement souterrain intégré verticalement (Dupuit-Boussinesq). On montre l'analogie avec la formulation plus générale des écoulements en milieux macroporeux à perte de charge quadratique (Ward-Forchheimer).

Puis une procédure de couplage surface/souterrain est développée. La procédure consiste à superposer les écoulements dans la rivière et l'aquifère, en additionnant les équations de conservation de masse dans chaque couche.

Cette procédure de couplage est généralisée au cas de l'intrusion saline en utilisant le modèle d'intrusion saline 2D plan proposé dans le chapitre 4 pour remplacer le module Dupuit-Boussinesq de la couche sol.

Le modèle d'écoulement de surface est validé avec la solution analytique de l'équation d'onde diffusive en 1D en permanent et en transitoire. Les tests montrent une bonne correspondance entre les profiles de la ligne d'eau et entre les flux calculées par le modèle numérique et la solution analytique.

Il n'existe pas de solution analytique pour le modèle couplé surface/souterrain. Celui là a été testé qualitativement par deux cas d'écoulement dans des géométries simplifiées. Le premier test est un domaine avec un canal à pente uniforme et un substratum à pente uniforme aussi. La dynamique du test montre le couplage entre la nappe et la rivière correctement. Le deuxième teste est un méandre

en U. Dans ce cas on considère le modèle couplé rivière aquifère avec intrusion saline. Dans ce cas aussi la dynamique semble être valide.

Enfin la méthode est appliquée à la modélisation de l'écoulement dans une partie de la vallée alluviale de la Garonne au niveau de Monbéqui, entre les villes de Toulouse et Moissac. Pour effectuer cette simulation, un modèle numérique intégrant le fond de la rivière et la topographie était indispensable. Une méthode pour l'obtention d'un modèle intégré numérique de terrain (MINT) à partir d'un nombre limité de sections de rivières est également élaborée et appliquée au site « Garonne ». Les résultats indiquent une bonne correspondance entre les résultats du modèle en permanent et les moyennes annuelles des mesures piézoélectriques.

## **Chapitre VI    CONCLUSIONS**



En conclusion, dans ce travail, on a traité de la modélisation des écoulements dans un hydro-système géologiquement « complexe » (hétérogène) pouvant comprendre en particulier un aquifère côtier soumis à l'intrusion saline (couplage eau douce / eau salée), auxquels peuvent se greffer d'autres phénomènes couplés (écoulements à saturation variable ; infiltration avec surfaces libres multiples ; couplages surface/souterrain). Une approche de modélisation spatialement distribuée est nécessaire pour appréhender ces phénomènes dans leur complexité physique et géométrique. Pour ce faire, on a privilégié à travers les différents chapitres de ce travail une approche fortement couplée, basée sur un modèle à une seule équation générique, permettant de décrire de coupler différents régimes d'écoulements.

Les différentes analyses et les résultats obtenus sont présentés de façon synthétique dans les sections suivantes, chapitre par chapitre. On peut cependant mettre en avant ici, sans aller dans les détails, les réalisations suivantes :

- L'élaboration et la validation d'un nouveau modèle mathématique et numérique 3D d'intrusion saline à interface abrupte, dit « pseudo-diphasique », basé sur des relations non-linéaires effectives de saturation-pression et de perméabilité-pression (Richards modifié) ;
- L'élaboration et l'implémentation d'un modèle verticalement intégré d'intrusion saline, permettant d'étudier l'effet de l'hétérogénéité stochastique sur le biseau salé en 2D plan ;
- L'analyse de variabilité de l'interface eau douce / eau salée à travers des simulations numériques de type « Monte Carlo », qui sont analysées statistiquement et comparés à une solution analytique nouvelle de problème, que nous avons obtenue par transformée, perturbations et représentations spectrales (Fourier-Wiener-Khinchine) ;
- Le couplage fortement « intégré » des écoulements plans de surface et souterrain, dans le cas d'une vallée fluviale avec nappe d'accompagnement. Ce modèle est appliqué à la vallée fluviale de la Garonne (France) dans la région Toulouse-Moissac. Au-delà de cette application, le modèle plan est ensuite généralisé au cas où la nappe est sujette à l'intrusion saline.

Nous résumons maintenant point par point nos différentes analyses et résultats.

#### ♦ **Modèle 3D d'intrusion saline à interface abrupte**

Un des objectifs de cette thèse est l'étude de l'intrusion marine dans les nappes souterraines côtières. Un modèle basé sur l'approche de l'interface abrupte en 3D est développé à partir du code BIGFLOW.

Ce modèle reprend les équations de Richards (1931) en les adaptant au problème de l'intrusion saline. Cela est fait à l'aide d'une définition de nouvelles courbes caractéristiques de rétention et de conductivité hydrauliques adaptée aux problèmes. Ces fonctions prennent en compte la division du domaine en trois zones : la zone saturée en eau douce, la zone non saturée en eau douce, et la zone saturée en eau salée. De plus, elles contournent le problème d'anti-diffusion ou diffusion négative qui parvient au niveau de l'interface eau douce/ eau salée. Une diffusion négative (même localement) est un obstacle majeur, car la matrice du système numérique n'est plus définie positive dans ce cas. Le modèle repose sur une hypothèse principale qui est de considérer la zone salée en équilibre hydrostatique. Bien que cette hypothèse soit proche de celle de Ghyben-Herzberg, elle permet néanmoins d'avoir un écoulement 3D sans aucune simplification dans la zone d'eau douce.

Le modèle est testé dans le cas de la solution analytique de Glover. Les résultats montrent une bonne correspondance entre les deux modèles, sauf au niveau de l'exutoire. En effet, le modèle analytique considéré a une épaisseur à l'exutoire nulle, ce qui est physiquement irréaliste car cela impliquerait une vitesse infinie dans la nappe à l'exutoire. Tandis que le modèle analytique va donner une position de l'interface plus réaliste à l'exutoire grâce à l'utilisation de la condition

dynamique entre l'eau douce et l'eau salée en chaque point du domaine. On peut ajouter que le modèle donne une estimation exacte de l'intersection de l'interface avec le substratum.

L'implémentation du modèle à interface abrupte en 3D avec deux fluides en mouvement sera un atout majeur vers la modélisation des aquifères côtiers avec de forts taux de pompages. Ce modèle aura l'avantage de ne pas ajouter de la diffusion numérique. En pratique les modélisateurs surévaluent la diffusion pour des raisons de stabilité numérique lors de l'utilisation des modèles avec zone de mélange, dans les cas d'études à grandes échelles. Par contre il sera difficile d'utiliser le modèle à interface abrupte dans le cas des aquifères qui sont sujets à la dissolution ou à la précipitation de sels. Enfin le modèle à interface abrupte n'est pas adapté au problème à fort contraste de densité ou des problèmes à double convection qui font intervenir de la thermoconvection.

#### ♦ **Modélisation stochastique analytique et numérique**

Un autre aspect étudié au cours de cette thèse est l'effet de l'hétérogénéité du milieu poreux sur la position de l'interface entre l'eau salée et l'eau douce.

Plusieurs simulations numériques sont effectuées sur des milieux moyennement jusqu'à fortement hétérogènes en perméabilité. Ces résultats sont confrontés à une solution analytique stochastique obtenue par analyse spectrale Fourier. La position de l'interface, qui est la variable d'intérêt, est statistiquement non-stationnaire. Pour appliquer la méthode spectrale/Fourier, on applique une transformation quadratique de la position de l'interface. L'étude spectrale Fourier est ainsi faite sur la transformée ( $\Phi$ ) statistiquement stationnaire obtenue. Enfin, on récupère les moments de la variable d'origine (la position de l'interface) à partir de ceux de la variable transformée ( $\Phi$ ). La comparaison entre les résultats de la solution analytique stochastique et les simulations numériques montre une bonne concordance loin de la mer.

Les résultats montrent aussi que l'augmentation de l'hétérogénéité en 2D plan de la perméabilité accentue le phénomène de l'intrusion saline en moyenne et l'incertitude de la position. L'analyse de l'incertitude de la position de l'interface est de l'ordre de plusieurs mètres pour un aquifère, de profondeur 30 m et de longueur 1000 m.

La solution analytique stochastique obtenue peut être utilisée pour une première estimation de l'incertitude de la position de l'interface eau douce / eau salée dans le cas d'une étude hydrogéologique préliminaire sur l'intrusion saline. Les données nécessaires pour la formule sont : la description de la structure d'hétérogénéité du milieu poreux à travers la moyenne, l'écart type et les longueurs de corrélation. Celles-ci peuvent être associées à des longueurs caractéristiques des structures d'hétérogénéité observées sur site.

Une future étude stochastique numérique et perturbative avec des modèles numériques et mathématiques 3D permettrait d'obtenir des résultats plus réalistes. On peut s'attendre à ce que ces modèles 3D donnent une incertitude plus faible de l'interface, vu que les chemins préférentiels seront plus nombreux que dans le cas d'une configuration 2D.

Une prise en compte des conditions limites du biseau salé à travers une approche stochastique prenant en compte la non-stationnarité due aux conditions limites, permettrait de se rapprocher des cas réels.

#### ♦ **Couplage surface / souterrain en écoulements plans**

Une méthode innovante est utilisée pour la modélisation couplée d'un système rivière/aquifère en écoulement plan.

Le modèle développé considère une seule équation générique pour les deux domaines de calcul. Cette équation exprime un écoulement de surface régi par les équations d'onde diffusive, et un écoulement en milieu poreux régi par les équations de Boussinesq. Les résultats obtenus montrent les échanges entre les deux systèmes, surtout au niveau des structures morphologiques complexes des rivières, telles que les méandres.



Ce modèle est appliqué à la Garonne au niveau du méandre de Monbéqui. L'utilisation de l'approche intégrée a nécessité d'élaborer une méthode d'interpolation pour l'obtention d'un Modèle Intégré et Numérique de Terrain (MINT). Ce modèle intégré permet d'obtenir une surface représentant la topographie complète du ou des lits de rivières, à partir d'un nombre limité de profils en travers combinés à d'autres données altimétriques.

#### ♦ Une approche intégrée et fortement implicite des couplages

Les différents éléments développés au cours de cette thèse ont pour objectif le développement et le test d'une approche intégrée pour la modélisation de régimes d'écoulements complexes, comprenant des hétérogénéités et des couplages entre différents compartiments » ou différents « régimes » d'écoulement dans une même simulation :

- ♦ milieu saturé et non saturé avec surfaces libres ;
- ♦ intrusions salines et biseaux salés ;
- ♦ interactions eaux de surface / eaux souterraines ;

L'approche proposée, fortement couplée, repose sur la formulation d'un modèle à une seule équation générique, qui peut représenter dans un même domaine de calcul différents types d'écoulements. Cependant, on notera que deux cas restent encore dissociés :

- ♦ écoulements plans « 2D » (verticalement intégrés, verticalement hydrostatiques) ;
- ♦ écoulements « 3D » (ou bien en coupe verticale).

#### ♦ Perspectives

Dans le futur, il serait souhaitable d'utiliser l'analogie entre écoulements verticalement intégrés souterrains et écoulements de surface, et de l'insérer dans le modèle d'écoulement 3D général existant. Ceci peut être réalisé, soit en y insérant des approximations de type verticalement hydrostatiques (dans le modèle 3D), et/ou, en généralisant le concept des milieux macroporeux au delà du strict cas de la loi d'écoulement de type Darcy / Ward-Forchheimer déjà prévue dans le modèle général 3D.

Ces généralisations pourraient permettre, tout en maintenant l'avantage d'un modèle à une seule équation, de simuler en trois dimensions des ruissellements avec infiltration/exfiltration sur des surfaces complexes, ou encore, de représenter, pour de « vrais » écoulements en rivières, les échanges et les traversées de structures poreuses superficielles et souterraines (lit de rivière, bancs de galets, nappe d'accompagnement).

Dans le cas des zones côtières de climat « méditerranéen », semi-aride par exemple, les interactions surface / souterrain (recharges de nappes par les oueds, déplétion de nappe par pompage, etc.) sont compliquées par les arrivées de sel. L'approche « intégrée » 3D envisagée ici pourrait permettre de représenter aussi ces effets, du moins en partie, grâce au modèle d'interface abrupte pseudo-diphasique 3D dont une première version a été testée dans ce travail.



## RÉFÉRENCES

Ababou R. Random Porous Media Flow on Large 3D Grids: Numerics, Performance, and Application to Homogenization, Chap.1, pp.1-25. In: IMA Vol 79 Mathematics and its Applications: Environmental Studies (Math. Comput. Statist. Anal.). Wheeler MF (ed.), Springer, NY, 410 pp. 1996.

Ababou R., Al-Bitar A., Peyrard D., Quintard M., Sanchez-Perez J.M., Sauvage S., Vervier P., Weng P. Modeling coupled surface / subsurface flow interactions : implementation and comparison of three models based on Darcy, Boussinesq / Saint Venant, and Boussinesq / diffusive wave, with application to the Garonne floodplain, Midi-Pyrénées, France. Proceedings IAHR-GW 2006 on "Groundwater Hydraulics in Complex Environments", Toulouse, France, 12-14 June 2006.

Ababou R., Trégarot G. Coupled Modeling of Partially Saturated Flows : Macro-Porous Media, Interfaces, and Variability. Proceedings CMWR 2002, Computational Methods in Water Resources, 23-28 June 2002, Delft, The Netherlands, 8pp.

Ababou R., Trégarot G., Larabi A. Partially Saturated Hydrological Flows : Numerical Experiments and Analyses. XII Internat. Conf. on Computational Methods in Water Resources (CMWR) Proceedings, The Chersonese, Crete, Greece, 8 pp., 15-19 June 1998.

Ababou R., Trégarot G., Bouzelboudjen M. Variably Saturated Subsurface Flow with Layers and Interfaces : Perched Water Tables and Stream-Aquifer Connection. ModelCare'96 Proc., International Groundwater Modeling Center (IGWC), GWMI Series No.96-OX, Colorado School of Mines, 10 pp., 25-27 Sept. 1996.

Ababou R. et Bagtzoglou A.C. BIGFLOW: A Numerical Code for Simulating Flow in Variably Saturated, Heterogeneous Geologic Media (Theory & User's Manual, Version 1.1), Report NUREG/CR-6028, U.S. Nuclear Regulatory Commission, Government Printing Office, Washington D.C., U.S.A., 139 pp. 1993.

Ababou R., Sagar B., and Wittmeyer G. Testing Procedures for Spatially Distributed Flow Models. Advances in Water Resources, Vol.15, pp. 181-198 1992.

- Ababou R., Gelhar L.W., et McLaughlin D., 1988. Three-Dimensional Flow in Random Porous Media, Report No. 318, Ralph Parsons Laboratory for Water Resources & Hydrodynamics, Massachusetts Institute of Tech., Cambridge, MA 02139, March 1988 (2 vols., 833 pp.).
- Abarca E., Carrera J., Sanchez-Vila. Anisotropic Dispersive Henry Problem., *Advances in Water Ressources*, doi :10.1016/j.advwatres.2006.08.005, 2006.
- Ackerer Ph., Younes A., Mosé R. Modelling variable density flow and solute transport in porous medium : 1. Numerical model and verification, *Transport in Porous Media*, Vol. 35, pp.345-373, 1999.
- Aharmouch A. Intrusion marine dans les aquifères côtiers : développement et tests de modèles numériques à éléments finis 3D, Thèse de doctorat Ecole Mohammadia d'Ingénieurs, Rabat, Maroc. 2003.
- Albitar A. & Ababou R. Random Field Approach to Seawater Intrusion in Heterogeneous Coastal Aquifers: Unconditional Simulations and Statistical Analysis, Chapter in *GeoENV: Geostatistics for Environmental Applications*, Renard P., Demougeot-Renard H., Froidevaux R. (Eds.), ISBN: 3-540-26533-3, Springer, 2005.
- Al-Bitar A. & Ababou R. Modeling of Salt Water Intrusion In Coastal Aquifers: Studying the effect of Heterogeneity and Uncertainties towards seawater intrusion remediation, Chapter in "Monitoring Modeling and Management of Coastal aquifers". Benavente J., Larabi A., El Mabrouki K. (eds.), pp.391-409, Water Research Institute, University of Granada, Spain, 2004. (ISBN: 84-699-7903-5).
- Al-Bitar A., Ababou R. Studying the effect of Heterogeneity and Uncertainties of Salt Water Intrusion In Coastal Aquifers. *Proceedings of the 1st International Conference on Thermal Engineering Theory and Applications (ICTEA)*, Beyrouth, Lebanon, 31 May–4 June 2004. Proc. paper ICTEA-ES1-05 (29 pp.), 2004.
- Al-Bitar A. & Ababou R., Coupled surface / groundwater flow via a Diffusive wave / Boussinesq model and undersharp interface saltwater intrusion conditions. Extended abstract in *Pre-Proceedings IAHR-GW2006 International Conference on "Groundwater Hydraulics in Complex Environments"*, Toulouse, France, June 12-14, 2006.
- Aharmouch, A, et Larabi A. Numerical Modeling of Saltwater Interface Upconing in Coastal Aquifers, in *Proc. First International Conference on Saltwater Intrusion and Coastal Aquifers-Monitoring, Modeling, and Management (SWICA-M3)*. Essaouira, Morocco, April 23-25, 2001.
- Aharmouch, A., Larabi A., et Hilali M. A 3D model for groundwater flow and seawater intrusion interface: Application to the Martil coastal aquifer system. In *Proc XIV Int. Conf. on Computational Methods in Water Resources*, Vol, 1, Density Dependent Flow and Transport, ed. S.M. Hassanizadeh, R.J. Schotting, W.G. Gray and G.F. Pinder. Elsevier, pp. 539-546, Delft, The Netherlands, 2002.
- Badon-Ghyben W. Nota in verband met de voorgenomen putboring nabij Amsterdam [Notes on the probable results of well drilling near Amsterdam] In: *Tijdschrift van het Kononklijk Instituut van Ingenieurs The Hague*, vol. 9. 1888. p. 8–22.
- Bakker, M., Oude Essink, G.H.P., Langevin C.D. The rotating movement of three immiscible fluids—a benchmark problem. *Journal of Hydrology* 287, 270–278, 2004.

- Bear J. Dynamics of fluids in porous media. New York: McGraw-Hill, 1972.
- Bear J. Dynamics of fluids in porous media. Mineola, NY, Dover, 1988.
- Bear J., Cheng A.H.-D, Sorek S., Quazar D., and Herera I., Editors, Seawater Intrusion into Coastal Aquifers-Concepts, Methods, and Practices, Kluwer Academic Publications, 625pp., 1999.
- Bedient P. B., Huber C. W. Hydrology and Floodplain Analysis (3rd ed.), 2002.
- Bittinger, M. W., Duke H. R., Longenbaugh R. A. Mathematical simulations for better aquifer management, *Pub. No. 72, IASH*, pp 509-519, 1967.
- Bouzouf B., Gloth O., Hanel D., Vilsmeier R., Simulation of discontinuous flows in porous media First international conference on Saltwater Intrusion and Coastal Aquifers Monitoring, Modeling and Management. Essaouira, Morocco, April 23-25, 2001
- Boussineq J., Recherches théoriques sur l'écoulement des nappes d'eau infiltrées dans le sol et sur le débit des sources, *C.R.H Acad. J. Math. Pures Appliquées* 10 5-78, 1904.
- Brooks R.H., Corey A.T. Hydraulic Properties of Porous Media. Hydrology paper 3, Colorado State University, Fort Collins, 1964.
- Brutsaert W. Probability laws for pore-size distributions. *Soil Sci.* 101:85-92, 1966.
- Buckingham E. Studies on the Movement of Soil Moisture. Bulletin No. 8, Washington, DC, US, Department of Agriculture, Bureau of Soils, 1907.
- Burdine N.T. Relative Permeability Calculations From Pore Size Distribution Data. *Petroleum Transactions, AIME*, Vol. 198, pp. 71-78, 1953.
- Campbell G.S. A Simple Method for Determining Unsaturated Conductivity from Moisture Retention Data. *Soil Science*, Vol. 117, No. 6, pp. 311-314, 1974.
- Carlier M. Hydraulique Générale et Appliquée. Collection de la Direction des Etudes et Recherches d'Electricité de France, Editions Eyrolles, 570 pp., 1986.
- Celia M.A., Bouloutas E.T., Zarba E.L. A General Mass-Conservative Numerical Solution for the Unsaturated Flow Equation, *Water Resour. Res.*, 26, 1483-1496, 1990
- Chaudhuri, A and Sekhar, M Analytical Solutions for Macrodispersion in a 3D Heterogeneous Porous Medium with Random Hydraulic Conductivity and Dispersivity. *Transport in Porous Media* 58(3):pp. 217-241, 2005.
- Cheng, A.H.-D. and Ouazar, D. (eds.), Coastal Aquifer Management-Monitoring, Modeling, and Case Studies, Lewis Publishers, 280 p., 2003.
- Childs E.C., Collis-George N. The Permeability of Porous Materials. *Proceedings of the Royal Society of London, Series A : Mathematical and Physical Sciences*, Vol. 201, pp. 392-405, 1950.
- Chow V.T., Maidment D.R., Mays L.W. Applied Hydrology. Mc Graw-Hill International Editions, Civil Engineering Series, 572 pp. 1988.
- Croney D. The movement and distribution of water in soils. *Géotechnique*, 3 (1), p. 1-16 (1952).

- Dagan G. Flow and transport in porous formations, Springer, Berlin, 1989.
- Darcy H.P.G. Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon, Exposition et Application des Principes à Suivre et des Formules à Employer dans les Questions de Distribution d'Eau. Paris, France, Victor Dalmont Ed., 1856.
- Delhomme, J.P. Spatial variability and uncertainties in groundwater flow parameters : a statistical approach. *Water Resources Research*, 152: 269-280, 1979
- de Marsily G. Hydrogéologie quantitative. Masson, 1981.
- de Marsily G. Quelques réflexions sur l'utilisation des modèles en hydrologie *Rev Sci Eau* 7(3) :219-234, 1994.
- Diersch H.J.G., Kolditz O. Variable-density flow and transport in porous media: approaches and challenges *Advances in Water Resources* 25, 899–944, 2002.
- Diersch H.J.G. Finite element modeling of recirculating density driven saltwater intrusion processes in groundwater. *Adv Water Resour*, 11(1):25–43, 1988.
- Diersch H.J.G., Prochnow D, Thiele M. Finite-element analysis of dispersion-affected saltwater upconing below a pumping well. *Appl Math Model*, 8:305–12, 1984.
- Diersch H.J.G., Nillert P. Saltwater intrusion processes in groundwater: novel computer simulations, field studies and interception techniques. *Int Symp Groundwater Monitoring and Management* 1987, Dresden, IAHS Publ no 173 1990:319–29.
- Di Giammarco P., Todini E., Lamberti P. A Conservative Finite Elements Approach to Overland Flow: the Control Volume Finite Element Formulation. *Journal of Hydrology*, Vol. 175, pp. 267-291, 1996.
- Dupuit J. Etudes Théoriques et Pratiques sur le Mouvement des Eaux dans les Canaux Découverts et à Travers les Terrains Perméables. 2nde édition, Dunod, Paris, 1863.
- Essaid H. I. A comparison of the coupled freshwater—saltwater flow and the Ghyben-Herzberg sharp interface approaches to modeling of transient behaviour in coastal aquifer systems, *J. Hydrol.*, 86, 169-193, 1986.
- Essaid H. I. A multilayered sharp interface model of coupled freshwater saltwater flow in coastal systems : Model Development and application, *Water Resour. Res.*, 26(7), 1431-1453, 1990a.
- Essaid H. I. The computer model HARP, a Quasi-Three Dimensional Finite-difference Model to Simulate Freshwater and Saltwater Flow in Layered saltwater flow in coastal Aquifers Systems, U.S. Geol. Survey Water-Res. Inv. Rept. 90-4130, 1990b
- Essink G. O. Improving fresh groundwater supply - problems and solutions. *Ocean and Coastal Management* 44:429-449, 2001.
- Freeze, R. A. et J. A. Cherry *Groundwater*, Prentice-Hall, New Jersey, 604 pp., 1979.
- Freeze R.A. and Witherspoon P.A. Theoretical analysis of regional groundwater flow: analytical and numerical solutions to the mathematical model: *Water Resources Research*, v. 2, n. 4, p. 641-656, 1966.

- Freeze R.A. Three-dimensional, transient, saturated–unsaturated flow in a groundwater basin. *Water Resources Research* 7: 347–366, 1971.
- Freeze, R.A. and Cherry J.A. *Groundwater*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, NJ, 604 pp., 1979.
- Frind E. Simulation of long-term transient density-dependent transport in groundwater. *Adv Water Resour* 5:73– 88., 1982
- Gambolati G., Pini G. & Zilli G. Numerical comparison of preconditionings for large sparse finite element problems, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, John Wiley & sons, Inc., 139-157, (1988b).
- Gambolati G., Putti M. & Paniconi C. Three-dimensional model of coupled density-dependent flow and miscible transport in groundwater. In Bear et al. (eds.) *Seawater intrusion in coastal aquifers: Concepts, Methods, and Practices*, chapter 10, pp. 315-362, Kluwer Academic, Dordrecht, The Netherlands, 1999.
- Gelhar, L. W. *Stochastic Subsurface Hydrology*, Englewood Cliffs, New Jersey, 1993.
- Golub G.H. & Van Loan C.F. *Matrix computations*. 2nd Ed., J. Hopkins Univ. Press, Baltimore, Maryland, 642 pp, 1989.
- Gunduz O. and Aral M.M. River networks and groundwater flow: a simultaneous solution of a coupled system. *J Hydrol* ;301:216–34, 2005.
- Hassanizadeh S.M. and Leijnse A. A non-linear theory of high concentration-gradient dispersion in porous media, *Adv. Water Resour.*, 4,203 –15, 1995.
- Haverkamp R., Vauclin M., Touma J., Wierenga P.J. A comparison of numerical simulation models for one dimensional infiltration, *Soil Sci. Soc. Amer. J.*, 41: 285-294. 1977.
- Henin H. Couplage entre modèles hydrologiques, Rapport de Master de Recherche IMFT/CESBIO, 2006.
- Henry H.R. Effects of dispersion on salt encroachment in coastal aquifers. In: *Sea water in coastal aquifers* US Geol Surv Water Supply Pap, 1613-C. p. 70–84, 1964..
- Henry,H. R. Interfaces between saltwater and freshwater in coastal aquifers, U.S. Geological Survey Water-Supply Paper 1613-C, *Sea Water in Coastal Aquifers: C35–C70*, 1964.
- Herbert A.W., Jackson C.P. and Lever D.A. Coupled groundwater flow and solute transport with fluid density strongly dependent on concentration, *Water Resour. Res.* 24(10), 1781–1795, 1988.
- Herzberg A. Die Wasserversorgung einiger Nordseebäder (the water supply of parts of the North Sea coast in Germany). *Z Gasbeleucht Wasserversorg*;44:815–9, and 1901;45:842–4., 1901.
- Holzbecher E. Modeling of saltwater upconing. In: Wang S, editor. *II Int Conf Hydro-Science and Hydro-Engin Proc vol. 2, Part A*, Beijing. p. 858–65, 1995.
- Hromadka T.V., Berenbrock C.E., Freckleton J.R., Guymaon G.L. A Two-Dimensional Dam Break Flood Plain Model. *Advances in Water Resources*, Vol. 8, No. 1, pp. 7-14, 1985.

- Huyakorn P.S., Anderson P.F., Mercer J.W., White Jr H.O. Saltwater intrusion in aquifers: development and testing of a three-dimensional finite element model. *Water Resour Res* 1987;23:293–312.
- Johannsen K., Kinzelbach W., Oswald S., Wittum G. The saltpool benchmark problem—numerical simulation of saltwater upconing in a porous medium. *Adv Water Resour* 25(3):335–48, 2002.
- Knupp P.M., Lage J.L. Generalization of the Forchheimer-Extended Darcy Flow Model to the Tensor Permeability Case via a Variational Principle. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 299, pp. 97-104, 1995.
- Kolditz O, Ratke R, Diersch H.J.G., Zielke W. Coupled groundwater flow and transport: 1. Verification of variable-density flow and transport models. *Adv Water Resour* 1998;21:27–46.
- Kollet S. J. and Maxwell R. M. Integrated surface-groundwater flow modeling: A free-surface overland flow boundary condition in a parallel groundwater flow model, *Advances in Water Resources*, (29)7, 945-958, 2006.
- Larabi A., and De Smedt F., Numerical solution of a 3D groundwater flow involving free boundaries by a fixed finite element method, *J. of Hydrology*, 201, 161-182, 1997.
- Lecca, G. Implementation and testing of the CODESA-3D model for density-dependent flow and transport problems in porous media. CRS4-TECH-REP-00/40, Cagliari, Italy, 2000.
- Lecca, G., & P. Cau. Estimating the impact of a discontinuous confining layer on the seawater intrusion using a stochastic approach: the Oristano coastal aquifer site (Sardinia, Italy). To be published in the *Proceedings of the Third International Conference on Saltwater Intrusion and Coastal Aquifers—Monitoring, Modeling, and Management (SWICA M3)*. Merida, Mexico, March 30 – April 2., 2003.
- Liggett, J. A., and P. L-F. Liu. *The Boundary Integral Equation Method for Porous Media Flow*, George Allen and Unwin, Boston, 1983.
- Matheron G. The Intrinsic Random Functions & Applications. *Adv. Appl. Prob.*, 5, 439-468, 1973
- Merwade V. M., Maidment D. R., and Goff J. A. Anisotropic considerations while interpolating river channel bathymetry. *Journal of Hydrology*, Volume 331, Issues 3-4, Pages 731-741, 2006.
- Mizell S.A., Gutjahr A.L., Gelhar L.W. Stochastic Analysis of Spatial Variability in Two-Dimensional Steady Groundwater Flow Assuming Stationary and Nonstationary Heads. *Water Resour Res* 18(4) 1053-1067, 1982.
- Mualem Y. A New Model for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Porous Media. *Water Resources Research*, Vol. 12, No. 3, pp. 513-522, 1976.
- Mualem Y., Dagan G. Hydraulic Conductivity of Soils : Unified Approach to the Statistical Models. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, Vol. 42, pp. 392-395, 1978.
- Muskat, M. *The Flow of Homogeneous Fluids through Porous Media*, McGraw-Hill Inc., New York. Reprinted by J. W. Edwards, Ann Arbor, 1937.



- Oberbeck A., Ueber die Wärmelaitung der Flüssigkeiten bei Berücksichtigung der Stromung infolge von Temperaturdifferenzen, *Ann. Phys. Chem.* 7 271–292, 1879.
- Panday S., Huyakorn P.S. A fully coupled physically-based spatially-distributed model for evaluating surface/subsurface flow. *Adv Water Resour* 27:361–82, 2004.
- Pinder, G. H., & Bredehoeft J. D. Application of the digital computer for aquifer evaluation, *Water Resour. Res.*,4, 1069-1093, 1968.
- Putti M. and Paniconi C. Picard and Newton linearization for the coupled model of saltwater intrusion in aquifer. *Adv Water Resour* 18(3):159–70, 1995.
- Putti M. and Paniconi C. Time step and stability control for a coupled model of surface and subsurface flow. *Proceedings of the XV International Conference on Computation Methods in Water Resources (CMWR XV)*, vol. 2. Chapel Hill, NC, USA: Elsevier; p. 1391–402, 2004.
- Reilly T.E., Goodman A.S. Analysis of saltwater upconing beneath a pumping well. *J Hydrol* ; 89:169–204, 1987.
- Remson, I., Appel C. A., & Webster R. A. Groundwater models solved by digital computer, *J.Hyd. Div. ASCE*, Vol. 91, no. HY3, pp 133-147, 1965.
- Remson I., Hornberger G. M. & Molz F. G. *Numerical methods in subsurface Hydrology*, John Wiley, NewYork, 389 pp, 1971.
- Richards L.A. Capillary conduction of liquids through porous media, *Physics* 1, 318-333, 1931.
- Sbai, M. A. Modeling three dimensional groundwater flow and transport by hexahedral finite elements., Ph.D. Thesis of Free University of Brussels (VUB), 1999.
- Sbai. M. A., De Smedt F. & Larabi A. A Generalized Approach for Modeling 3D Transient Free and Moving Boundaries in Coastal Aquifers. In *Proc. First International Conference on Saltwater Intrusion and Coastal Aquifers- Monitoring, Modeling and Management*. Essaouira Morocco, April 23-25, 2001.
- Segol G., Pinder G.F., Gray W.G. A Galerkin-finite element technique for calculating the transient position of the saltwater front. *Water Resour Res*;11(2):343–7, 1975
- Tompson A.F.B, Ababou R, Gelhar LW Implementation of the Three-Dimensional Turning Bands Random Field Generator, 2227-2243. *Water Resour. Res.* 25(10), 1989.
- Tang D.H. and Pinder G.F. Analysis of mass transport with uncertain physical parameters. *Water Resources Research*, 15 (5), 1147-1155, 1979
- Touma, J., Vachaud, G., and Parlange, J.-Y. Air and water flow in a sealed ponded vertical soil column. *Soil Sci.* 137: 181-187, 1984.
- Trégarot G. Modélisation Couplée des Ecoulements à Saturation Variable avec Hétérogénéités, Forçages, et Interfaces Hydrologiques. Thèse de Doctorat - Institut National Polytech. Toulouse (Sci.Terr.Env.). Institut Mécanique Fluides Toulouse, France, May 2000.
- Vanmarcke, E.H. *Random Fields: Analysis and Synthesis*, The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1983.

- Voss C. and Souza W. R. Variable density flow and solute transport simulation of regional aquifers containing a narrow freshwater-saltwater transition zone, *Water Resour. Res.* 23(10), 1851–66, 1987.
- Voss C.I. A finite-element simulation model for saturated-unsaturated fluid-density-dependent ground-water flow with energy transport or chemically-reactive single-species solute transport. US Geol Surv Water Resour Invest 409 pp. [Rep 84-4369], 1984.
- Voss C.I. USGS SUTRA Code—History, practical use, and application in Hawaii. In: Bear J, Cheng AHD, Sorek S, Quazar D, Herrera I, editors. *Seawater intrusion in coastal aquifers*. Dordrecht: Kluwer Publ; p. 249–313, 1999.
- Voss C.I., Souza WR. Variable density flow and solute transport simulation of regional aquifers containing a narrow freshwatersaltwater transition zone. *Water Resour Res*;26:2097–106, 1987.
- Vogel P., *Zur Theorie binärer Fluidgemische in porösen Medien*, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover, 1995.
- Volker R.E., Rushton K.R. An assessment of the importance of some parameters for seawater intrusion and a comparison of dispersive and sharp-interface modeling approaches. *J Hydrol* ;56:239–50, 1982.
- Ward J.C. Turbulent Flow in Porous Media. *Journal of the Hydraulics Division, Proceedings of the ASCE*. Vol. HY 5, pp. 1-12, 1964.
- Weng P., Sanchez.Perez. J.M., Sauvage.S., Vervier.P., and Giraud F. Assessment of the quantitative and qualitative buffer function of an alluvial wetland : hydrological modelling of a large floodplain (Garonne River, France), *Hydrological Processes*, Vol.17 (2), pp. 2375-2392, 2003
- Wösten J.H.M., Finke P.A., Jansen M.J.W. Comparison of Class and Continuous Pedotransfer Functions to Generate Soil Hydraulic Characteristics. *Geoderma* Vol. 66, pp. 227-237, 1995.
- Van Genuchten M.T. A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, Vol. 44, pp. 892-898, 1980.
- Wu Y.-S., Forsyth P.A., On the selection of primary variables in numerical formulation for modeling multiphase flow in porous media *Journal of Contaminant Hydrology* 48,277–304, 2001
- Younes A. On modelling the multidimensional coupled fluid flow and heat or mass transport in porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 46 367–379, 2003
- Younes A., Ackerer Ph., Mosé R., Modelling variable density flow and solute transport in porous medium : 2. Re-evaluation of the salt dome flow problem, *Transport in Porous Media*, Vol. 35, pp.375-394, 1999.
- Zammit C. Analyse et Evaluation des Paramètres des Caractéristiques Hydrodynamiques des Sols. Prediction par un Modèle Analytique à Base Physique à partir de Données Texturales. Thèse de Docteur de l'Université Joseph Fourier - Grenoble 1, 200 pp., 1999.
- Zhang D. *Stochastic Methods for Flow in Porous Media Coping with Uncertainties* Academic Press, San Diego, CA. 350 pp. ISBN: 0-12-779621-5, 2002.

Zheng, C. MT3D, A Modular Three-Dimensional Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems, Report to the U.S. Environmental Protection Agency Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory, Ada, Oklahoma, 1990.

## **ANNEXES**

<b>ANNEXE A – Revue de codes de calcul numériques - Review of GW codes</b>	<b>127</b>
<b>ANNEX B – Code de calcul Bigflow – Bigflow code</b>	<b>133</b>
<b>ANNEXE C - Memory requirements of BIGFLOW 2D SWIM</b>	<b>142</b>
<b>ANNEXE D- Spectral/Fourier Analysis and Up-scaling</b>	<b>144</b>

## ANNEXE A Revue de codes de calcul numériques - Review of GW codes

Based on the classification and criteria presented in chapter 2, we present here a representative selection of computer codes geared towards GW flow modelling, with at least some coupling aspects taken into consideration (first and foremost, the saltwater density coupling, and then, the coupling to surface flow and other hydrogeological processes).

The list below is meant to complete the list given in Chapter 2 even though it isn't exhaustive. To give just one example, the FRAC3DVS code (Ed Sudicky, University Waterloo, Canada) has not been documented here, although it includes several features of interest in the framework of this review. Also, it should be noted that some of the codes are commercial, while others are non-commercial and/or research codes (publicly available).

We present here a representative selection of computer codes geared towards GW flow Modeling, with at least some coupling aspects taken into consideration: first and foremost saltwater density coupling, and secondly, the coupling to surface flow and other hydrogeologic processes.

### A.1 - MODFLOW (MODular 3-D finite difference FLOW)

Authors: McDonald and Harbaugh 1988  
Harbaugh and McDonald 1996  
other contributors to different packages  
(USGS staff and many contributors)

Code status: Publicly available (USGS)

Some packages are not publicly available, e.g. AMG (Algebraic Multi Grid).

Description: Originally a 3D finite-difference GW flow code, MODFLOW has evolved over the years to become a family of compatible codes. Actually many packages have been constituted as add-ons to MODFLOW, mainly the SWI package presented later in this section. Several developers combined MODFLOW with other advection-dispersion codes to model saltwater intrusion. Similar codes are presented in this review, below (i.e. SEAWAT, MOCDENS3D). Some other commercial software are also available for post and pre processing in MODFLOW.

Web site: <http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware/modflow2000/modflow2000.html>

### A.2 - MT3D, MT3DMS (and SEAWAT)

- MT3DMS (Modular 3-D Transport model with Multi-Species add-on reaction packages)

Author: C. Zheng et al.

Code status: Publicly available (The Hydrology Group - University of Alabama)

Description: Three types of solutions methods have been implemented in MT3DMS : the standard finite difference method; the particle-tracking-based Eulerian-Lagrangian methods; and the higher-order finite-volume TVD method. MT3DMS uses the flow computed from a finite-difference flow model to model the transport of species assuming that changes in the concentration field will not affect the flow field significantly. This approximation is not suitable a priori for saltwater intrusion modeling.

Web site: <http://hydro.geo.ua.edu/mt3d/>

### A.3 - SEAWAT-2000

Authors: Guo Bennett and Christian D. Langevin (SEAWAT)

Christian D. Langevin, W. Barclay Shoemaker and Weixing Guo (SEAWAT 2000)

Code status: Publicly available (USGS)

Description: SEAWAT is based on coupling MT3DMS with the TVD option for salt advection-diffusion and MODFLOW with density updates for flow Modeling. The code is structured in a way that the two last codes have been combined into a single programme. The code has been used by partner 6 of the SWIMED project study of the Gaza aquifer (Palestine). A more detailed description of the code is presented in the next section. SEAWAT has also been used, for instance, for modeling seawater intrusion in the Biscayne Bay (Florida), as documented in the web site referenced below.

Web sites: <http://water.usgs.gov/ogw/seawat/seawatv2.html>  
<http://water.usgs.gov/ogw/seawat/seawat2k.html>

### A.4 - MOC & MOCDENS

- MOC (Method Of Characteristics) is a 2D code capable of Modeling advective transport hydrodynamic dispersion mixing or dilution from fluid sources and some chemical reactions. It is based on a finite difference for the flow equation and methods of characteristics for the transport equation. The particle tracking procedure is used for advective transport and explicit finite difference procedure for the hydrodynamic dispersion. The advantage of the method is that it reduces numerical dispersion, large numerical oscillations and non-convergence of the solute transport equation because there are no restrictions on spatial discretization.

Reference : Konikow and Bredehoeft, 1978

- MOCDENS (Method Of Characteristics DENSITY dependent flow) is based on MOC. It simulates two constituents in a density dependent flow system (not detailed here)...

Reference: Sanford and Konikow, 1985.

- MOC3D a 3D version of MOCDENS that uses MODFLOW for solving the flow equations (flow system) – not detailed here...

Reference: Konikow et al., 1996

### A.5 - MOCDENS3D

**Author:** G.H.P. Oude Essink, 2001

**Code status:** (not available to us).

**Description:** MOCDENS3D is a modified version of MOC3D. The groundwater model consists of an enhanced version of MODFLOW taking into account vertical density differences. The hydraulic head is computed from the fluid density with respect to a reference density (the freshwater density). Introducing this hydraulic head into the vertical component of the Darcian specific discharge, and discarding the viscosity difference, gives a buoyancy term. The discretization of the so called buoyancy term in the flow equation gives two terms which are added to the right hand side term (RHS term) of the original MODFLOW equations. However, the density differences are neglected in the continuity equations: the author assumes that density variations are considered small compared with the value of the

reference density in the mass conservation equation. The computed velocities are then used in the (non buoyant) solute transport model, which is the original transport model of MOC3D.

## **A.6 - MARTHE BRGM**

Authors : Thierry D., 1990, 1993; Thierry and Amraoui, 2001

Code status: available for research studies on demand (BRGM)

Description: MARTHE software package. MARTHE software package is developed by BRGM France. MARTHE is a hydrodynamic software that processes three-dimensional flow by solving a discretized form of Darcy's equation (Darcy, 1856) in a saturated environment or Richards' equation (Richards, 1931) in an unsaturated environment. This software also has modules for the coupling of a drainage network, for mass-transport simulation, and for processing the effects of density and temperature in the aquifer.  
website: <http://www.brgm.fr/pdf/logiciels/Marthe.pdf>

## **A.7 - SUTRA2D & SUTRA3D (Saturated-Unsaturated TRANsport)**

Authors: Clifford I. C. Voss and Provost, A.M. (SUTRA2D3D)

Code status: Publicly available (USGS)

Description: The original version "SUTRA" is in 2D, and a beta release of the 3D version, called "SUTRA3D" is also available now. The SUTRA 2D & 3D code can model density dependent and/or unsaturated flow (nonlinearities) and transport in subsurface with/without single species chemical reactions. Exhaustive documentation is available for the two versions. The use of finite-element and integrated-finite-difference hybrid method allows great numerical flexibility in the governing equations discretization. The author stress that SUTRA will provide clear, accurate answers only to well-posed, well-defined, and well-discretized simulation problems this would suggest that the used numerical scheme is greatly sensitive to discretization parameters. The Peclet number criterion is  $Pe \leq 4$ . In the case of a not-well posed problem the codes is presented as a "hypothesis testing" tool. The code includes the iterative matrix solver SLAP Common Mathematical Library (Vandevender and Haskell, 1982). The SLAP package contains a CG solver (Conjugate Gradients), a GMRES solver (Generalized Minimum RESidual), and an ORTHOMIN solver. The CG is employed for symmetric matrix systems obtained generally in the GW flow equations. The GMRES and the ORTHOMIN are invoked to solve non-symmetric systems encountered in advective transport equations or numerically analogous problems, e.g. flow equations treated with upstream weighting schemes.

Web site: <http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware/sutra.html>

## **A.8 - SWI package for MODFLOW**

Authors: M. Bakker and F. Schaars

Code status: Publicly available

Description: The SWI (Salt Water Intrusion) package of MODFLOW is based on the Dupuit-Boussinesq approximation in each layer of a stratified aquifer (Strack 1995). Each aquifer can be modelled with a single layer of cells through vertical averaging of horizontal velocities within each layer. Communications are possible through leaky layers. The effect of viscosity is neglected (as in most other vertically integrated models). The SWI package is intended to model

seawater intrusion on a regional scale. Water density are considered to vary either uniformly or linearly within in each layer. That is, in the case of horizontal layers, the vertical density profiles are either linear or else constant within each layer. A single input file is needed to obtained the required modifications of MODFLOW to treat the flow problem with variable density flow (specification of a distribution of sources).

Web site: <http://www.engr.uga.edu/%7Embakker/swi.html>

## **A.9 - MOD-HMS (MODFLOW Hydrologic Modeling System)**

Authors: Sorab Panday and Don De Marco

Code status: Commercial code (Hydrogeologic Inc.)

Description. HydroGeoLogic Inc. developed [MOD-HMS](#) (MODFLOW - Hydrologic Modeling System) for numerical simulation of complex groundwater-surface water interactions. According to its authors, MOD-HMS is a comprehensive, physically-based spatially-distributed model that overcomes both the functional and computational limitations of previous models. In particular, MOD-HMS integrates all components of the hydrologic cycle in a single model that utilizes a mass conservative approach whereby the surface water flow equations are fully coupled with the 3-D, variably saturated groundwater flow equations. The authors claim that this approach is significantly more robust than previous conjunctive approaches that rely on linkage of separate surface water and groundwater codes. In other words : the fully implicit coupling approach used by MOD-HMS provides for a mass conserved solution scheme essential for systems with strong interactions between regimes. The MOD-HMS code has additional capability for contaminant transport modeling.

web site: <http://www.hgl.com/software/MOD-HMS.cfm>

## **A.10 - SHARP**

Author: Hedef Essaid

Code status: Publicly available (USGS)

Description: SHARP is a specialized GW flow code to simulate freshwater and saltwater flow separated by a sharp interface in layered coastal aquifer systems. It is quasi-3D according to its authors (2D plane flow in each aquifer layer).

Numerical method: An implicit finite-difference discretization scheme, central in space and backward in time (fully implicit) is used to solve the freshwater and saltwater flow equations for each model layer. Spatial discretization is achieved using a block-centered finite-difference grid that allows for variable grid spacing. In the central difference approximations for space derivatives, the thicknesses at grid block boundaries are linearly interpolated, and the internode conductivities are estimated as harmonic means of nodal conductivities.

Treatment of saltwater interface. At blocks containing pumping wells, the amount of freshwater and saltwater extracted depends on the position of the interface relative to the elevation of the screened interval of the well. The rate of freshwater and/or saltwater extraction from a block, relative to the total fluid extraction rate, is determined linearly on the basis of the proportion of screen penetrating the freshwater and saltwater zones relative to the total open interval of the well. The interface elevation in each finite-difference block is calculated using the numerically-determined freshwater and saltwater head distributions. The shape of the interface is obtained by connecting the discretized interface elevations. The position of the interface tip (the intersection of the interface with the top of the aquifer and the interface toe (the intersection of the interface



with the bottom of the aquifer) are located by linearly projecting a line defined by the interface elevations in adjacent blocks until it intersects the top and bottom of the aquifer.

Web site: <http://water.usgs.gov/software/sharp.html>

### **A.11 - DYNSSYSTEM (DYNFLOW-DYNCFT-DYNSWIM DYNTRACK)**

Author: Brendan Harley, CDM Boston

Code status: Commercial (DYNASYSYSTEM / CDM Boston)

Description: The code is presented as an integrated water resources modeling tool with a modular structure. The flow module DYNFLOW is a finite element 3D code based on the AQUIFEM code developed at MIT in the 1970's. Two modules are convenient for SWIM. The DYNSWIM module takes into consideration a sharp interface assumption. The DYNCFT is the coupled flow-transport modeling code of the DYNSSYSTEM, based on a particle tracking lagrangian approach. A study has been undertaken using DYNCFT to model Sea Water Intrusion in the Gaza aquifer (Fitzgerald et al 2001).

Web site: <http://www.dynsystem.com/index.html>

### **A.12 - SALTFLOW**

Author: J.W. Molson and E.O. Frind

Code status: Copyright protected (University of Waterloo, Canada)

Description: The code solves the fully coupled mass and transport equations using a 3D Finite Elements - Brick Elements discretization method. The porous media are considered saturated. A special time-weighting scheme (Leismann and Frind, 1989) combined with a standard Galerkin finite element method is used to maintain matrix symmetry. This special scheme is more or less equivalent to treating the advective terms explicitly. The final matrix equations for both the flow and mass transport problems are solved using a preconditioned conjugate gradient solver (PCG), appropriate for symmetric systems.

Web site: <http://sciborg.uwaterloo.ca/~molson/>

### **A.13 - HBGC**

HBGC: Hydrologic Transport and Mixed BioGeoChemical Reactions in Saturated-Unsaturated Media

Author: G.T.Yeh et al (Penn. State Univ.)

Code status: Publicly available (ORNL Oak Ridge Nat. Lab)

Description: The code is suitable for simulating flow in porous media with chemical reactions and biological processes. The transport equation is solved in 2D which limits the code to 2D applications. Quadrilateral and triangular elements are enabled in the finite element method. The Newton-Raphson iteration technique is used to linearize the system. The linear problem is then solved with one of the six following solvers: direct solution with Gaussian elimination method, successive point iterations, and four preconditioned conjugate gradient methods. It seems that only the PCG solvers are convenient for real case complex problems.

Web site: <http://hbgc.esd.ornl.gov/>

**A.14 - TOUGH & TOUGH2**

Author: K. Pruess and other contributors

Code status: Available on licence (Earth Sciences Division, Lawrence Berkley Laboratory)

Description: The TOUGH code is a thermo-hydraulic code for porous media. It takes account heat transfer and phase change effects in multicomponent, multiphase fluids, in subsurface flows (3D). Unsaturated and saturated zones can be modelled. Several preconditioned linear solvers are implemented, like the BICGSTAB. The code is programmed in ANSI standard Fortran 77 to ensure portability.

Web site: <http://esd.lbl.gov/TOUGH2/>

**A.15 - FEFLOW (Finite Element subsurface FLOW system)**

Authors: Diersch, 1996 and other contributors

Code status: Commercial (WASY Software)

Description: FEFLOW uses finite element method to solve the differential equations governing flow and transport in subflow systems. It is capable of modeling fluid density effects caused by contaminant, mass, and temperature differences simultaneously.

## ANNEXE B Code de calcul Bigflow – Bigflow code

### Status and authors:

**Main Author:** R.Ababou

- 1987: BIGFLO (3D): university research code  
(R.Ababou, L.W.Gelhar & D.McLaughlin, MIT, Cambridge, Massachusetts)
- 1993: BIGFLOW 1.1 (3D): public domain research code  
(R.Ababou & A.C.Bagtzoglou, US Nuclear Regulatory Commission, Wash. D.C.)
- 2000: BF2000 (2D/3D): research code  
(R.Ababou & G.Trégarot, Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, France)
- 2005 : BF2005 / BF-Python (2D/3D) : current research code,  
with seawater intrusion & Python interface under construction  
(R.Ababou & A.Al-Bitar, Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, France)

**Abstract.** The spatially distributed flow model BIGFLOW (BF2000) is a generalized multidimensional 2D & 3D model for variably saturated flow processes in heterogeneous, anisotropic, macroporous, and partially saturated media. For instance, the model can efficiently represent the 3D dynamics of multiple interacting free surfaces. In addition, a vertically integrated 2D plane flow flow option is available, with several specialized capabilities including surface hydraulics coupling, and seawater intrusion. The general model is based on a single generalized 2D/3D nonlinear conservative flux-divergence equation (mixed form), discretized as a very sparse implicit finite volume system and solved using preconditioned conjugate gradient and modified Picard (fixed point) iterations. The material properties can be distributed arbitrarily in all directions. The code has been useful for direct simulations of highly heterogeneous GW flow problems on large grids (10 million nodes), but also, more recently, for simulating nonlinear/coupled phenomena such as perched water tables, stream-aquifer-soil interactions, fast flow in single fractures and macroporous systems.

### B.1 - BIGFLOW - Introduction and overview (2D & 3D)

The BIGFLOW code, named “BF” for short, is the research code used by the french partner (Partner 3 of SWIMED project) to develop analyses on porous media hydrodynamics and hydrogeologic processes, particularly in the presence of heterogeneities and couplings.

Historically, BIGFLOW was initiated as a numerical tool for modeling 3D flow systems in randomly heterogeneous geologic formations, considering first only saturated GroundWater flow (Ababou et al. 1985) then unsaturated flow in heterogeneous soils (Ababou et al. 1987 & 1988) porous media with high resolution. The code was extensively tested between 1988 and 1992 resulting in a published manual of BGFLOW version 1.1 was published by the U.S. Nuclear Regulatory Commission (Ababou & Bagtzoglou 1993). The BIGFLOW code was later reshaped and enhanced, leading to BF-2000, a computer code for modeling diverse flow processes in heterogeneous variably saturated hydrologic media, including some surface/subsurface coupling. The BF2000 code is well documented in the Ph.D. thesis of Trégarot (2000).

The spatially distributed flow model BF2000 generalizes variably saturated flow processes for heterogeneous, anisotropic, macroporous, and partially saturated media in 3D. The model can also efficiently track the dynamics of multiple interacting free surfaces in 3D. The model can accommodate nonlinear, anisotropic and heterogeneous material properties, in (x,y,z) for the 3D case, or in (x,y) for the 2D vertically integrated case. A new 2D module BFSWIM was introduced

more recently in BF2000 to take into account saltwater intrusion modeling, and also, internal sink/source terms .

The BF code has two rather different options, 2D/3D, each one leading to various possible flow regimes as illustrated in the flow-charts below option (BF-3D) and 2D option (BF2D):

- 3D option (BF-3D): finite volume model for fully heterogeneous, three-dimensional, variably saturated and nonlinear (porous or macroporous) soil-aquifer systems (figure 1).
- 2D option (BF-2D): finite volume model for vertically integrated quasi-plane flows, including Boussinesq-Dupuit aquifer flows, free surface hydraulics based on kinematic wave, Darcy-Forchheimer flow in rough fractures, and the seawater intrusion module.

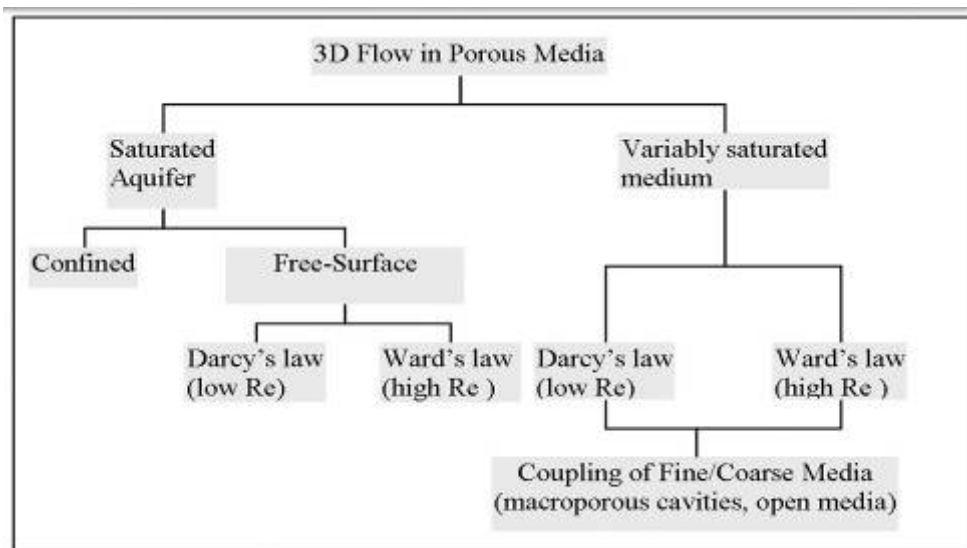


Figure 1: 3D options with BIGFLOW (note the 3D Saltwater intrusion model is not listed here).

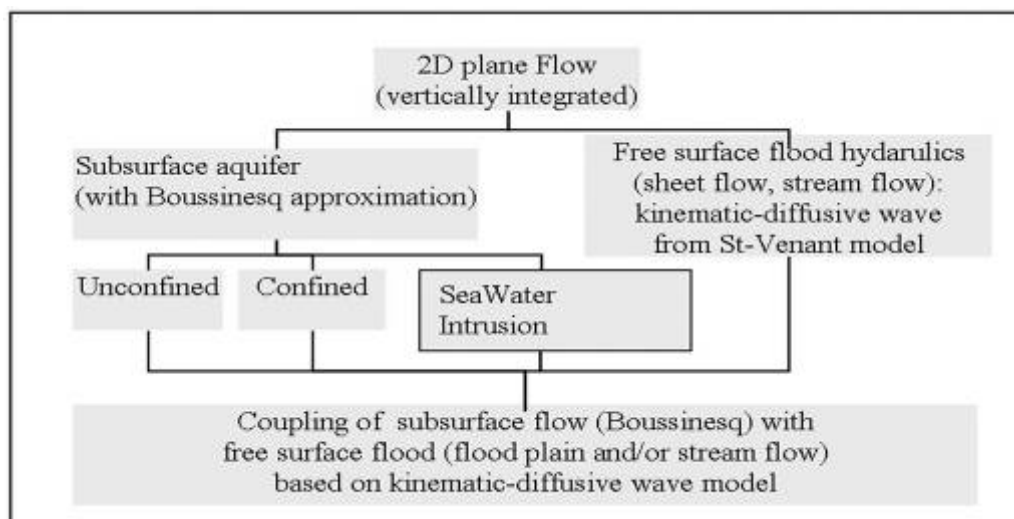


Figure 2: 2D options with BIGFLOW.

### Remarks on 2D vs. 3D

The 3D option is fully three-dimensional, in the sense that all material properties being arbitrarily distributed in 3D space. On the other hand, the 2D option is vertically integrated and assumes quasi-plane flow (vertically hydrostatic). It should be emphasized, however, that the internal computational structure of the code is 3D. Indeed, the 2D option was developed by specializing the general algorithms of the code without modifying its internal 3D structure.

The 3D algorithms of the BF code have been tested quite extensively since the late 1980's, and many features of the more recent 2D plane flow algorithms have been tested since the late 1990's (see references: Ababou et al.; Trégarot et al.).

### Remarks on Sea Water Intrusion Modeling (SWIM)

In this report, we choose to emphasize the general capabilities of the 2D/3D code as they existed at the start of the project, rather than the new seawater intrusion modeling capabilities. Indeed, for the present project on coastal aquifers, a new algorithm for seawater intrusion was developed into the 2D version of BF, called BF-SWIM2D, to be described in deliverable “**D7: Seawater**”

## B.2 - BIGFLOW - Model equations and physical basis (2D & 3D)

BIGFLOW is an integrated model for groundwater and hydrologic flow processes based on a unified, generalized, conservative flux-divergence equation obtained from Darcy-Buckingham and mass conservation (see equations in Figure 3 below).

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{Hydraulic Head} & \hat{H} = \hat{h} + \hat{\mathbf{g}}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{x} \\ \text{Darcy's Law} & \hat{\mathbf{q}} = -\hat{\mathbf{T}}(\hat{h}, \nabla \hat{H}, \mathbf{x}) \nabla \hat{H} \\ \text{Mass conservation} & \frac{\partial \hat{\theta}_e(\hat{h}, \mathbf{x})}{\partial t} = -\text{div}[\hat{\mathbf{q}}] \end{array} \right.$$

$$\boxed{\frac{\partial \hat{\theta}_e(\hat{h}, \mathbf{x})}{\partial t} = \text{div}[\hat{\mathbf{T}}(\hat{h}, \nabla \hat{H}, \mathbf{x}) \nabla \hat{h}] + \text{div}[\hat{\mathbf{T}}(\hat{h}, \nabla \hat{H}, \mathbf{x}) \hat{\mathbf{g}}(\mathbf{x})]}$$

Figure 3: BF single generic equation governing flow in several hydrologic configurations. Descriptions of variables and parameters are given in Table 0.1 and Table 0.2

Several types of flows can be derived from this single generic equation. BF can also implements strong implicit coupling of different types of hydrologic flows via it's single generic equation (e.g. coupled stream-aquifer flow, macroporous media with quadratic head loss law, perched groundwater with multiple free surfaces, etc). Table 0.1 and Table 0.2 give the description of the variables and parameters in the generic equation for the different configurations given in **Error! Reference source not found.** and **Error! Reference source not found.**. The **tables(1 & 2)** list the flow regimes that can occur in different cells of the flow domain, depending on the coefficients. Each line corresponds to a type of flow regime. Different flow regimes can co-exist in the same flow domain (the 2D/3D options are mutually exclusive).

3D Flow Modules	$\hat{h}$	$\hat{\theta}_e$	$\hat{T}$	$\hat{g}$
Variably saturated flow in classical porous media (Darcy-Richards)	$h$ PRESSURE HEAD	$\theta_e(h)$ WATER CONTENT	$K(h)$ HYDRAULIC CONDUCTIVITY	$\mathbf{g}_B = -\mathbf{g}/ \mathbf{g} $ GRAVITY TERM
Variably saturated non-darcian flow in macro-porous media (Ward-Richards)	$h$ PRESSURE HEAD	$\theta_e(h)$ WATER CONTENT	$\frac{2K_s(h)}{\delta + (\delta^2 + 4\gamma K_s(h) \nabla H \cdot \mathbf{K}(h) \nabla H)^{1/2}}$ MODIFIED HYDRAULIC CONDUCTIVITY (for non-darcian head)	$\mathbf{g}_B = -\mathbf{g}/ \mathbf{g} $ GRAVITY TERM
Variably saturated or free surface flows in macro-porous media (Fast Kinetics)	$h$ PRESSURE HEAD	$\theta_e(h)$ WATER CONTENT (Step function)	$K(h)$ HYDRAULIC CONDUCTIVITY (Step function)	$\mathbf{g}_B = -\mathbf{g}/ \mathbf{g} $ GRAVITY TERM
Fully saturated porous media (confined aquifers)	$H$ HYDRAULIC HEAD	$S_s H$ WATER STOCK	$K_s$	0

Table 0.1: Variables and parameters of the generic flow equation BF (3D option)

2D Plane Flow Modules	$\hat{h}$	$\hat{\theta}_e$	$\hat{T}$	$\hat{g}$
Unconfined planar groundwater flow (Dupuit-Boussinesq)	$\eta$ WATER DEPTH TO BEDROCK	$\phi \times \eta$ SATURATED THICKNESS	$K_s \times \eta$ HYDRAULIC TRANSMISSIVITY	$\nabla Z_{br}$ BATHYMETRIC GRADIENT (from bedrock topography)
Confined planar groundwater flow (Dupuit-Boussinesq)	$H$ HYDRAULIC HEAD (vertically averaged)	$S_s (Z_{ro} - Z_{wt})$ WATER STOCK	$K_s \times (Z_{ro} - Z_{wt})$ HYDRAULIC TRANSMISSIVITY	0
Free surface flood, sheetflow, streamflow (Kinematic-diffusive wave from St-Venant)	$\eta$ WATER DEPTH TO RIVER BED	$1 \times \eta$ WATER DEPTH TO RIVER BED	$\left[ \frac{\eta^{1/2}}{c_1(\eta) [\nabla Z_s \cdot (c(\eta)^{-1} \nabla Z_s)]^{1/2}} \right] \eta$ MODIFIED HYDRAULIC TRANSMISSIVITY (for Chezy/Manning-Strickler head loss laws)	$\nabla Z_{br}$ BATHYMETRIC GRADIENT (from bedrock topography)

Table 0.2: Variables and parameters of the generic flow equation BF (2D option)

### B.3 - BIGFLOW - Inputs / Parameters / Limitations

- **General inputs**

These are to define the main aspect of the simulation like type of simulation, transient/steady state simulation, and linear/nonlinear prob. There are also the less important identification code and date of simulation.

- **Domain geometry**

BF assumes that the 3D domain has the shape of a rectangular box (parallelepiped rectangle). However the box can be slanted at any angle with respect to the vertical. The finite difference mesh is a fixed regular network of orthogonal links and nodes. Never the less physical boundaries like substratum bathymetry and surface topography, used in the coupled surface-subsurface flow, can be distributed uniformly or spatially over the domain.

- **Boundary conditions and initial conditions**

BF enables the use of three types of boundary conditions (BC) Dirichlet (fixed head), Neumann (fixed flux) and zero head gradient BC. All types can be fixed, uniformly or spatially distributed. Time dependence is also available. Mixed type BC can be defined separately for each BC. Mixed type means that the type of BC can vary within the boundary plane. Initial head pressures can be defined as fixed, uniformly distributed or spatially distributed.

- **Forcing Terms**

Internal forcing terms are given in two different ways either locally for source/sink terms (e.i. pumping/recharge wells), or uniformly distributed over the domain. In the latter case these represent recharge or infiltration rates. Forcing terms are also time-varying.

- **Physical Properties**

- **For all cases:** hydraulic properties are specified cell-by-cell (pixels in 2D, voxels in 3D)
- **For subsurface flow:** hydraulics properties for saturated media are the hydraulic conductivity ( $K_s$ ) and the specific storativity ( $S_s$ ) both are spatially variable if needed. For spatially saturated or unsaturated media the hydraulic conductivity ( $K$ ) is a function of pressure head  $h$ . The soil moisture retention curve can be chosen among several functions with multiple parameters, two of which can be spatially distributed.
- **For surface flow:** where the diffusive-kinematic wave equations are applied, the hydraulic properties are the friction coefficients ( $C$ ) derived from the Chezy, Manning or Darcy-Weisbach formulas.
- **For macroporous media flow:** another coefficient ( $\gamma$ ) of the quadratic term in the generalized Ward's law is defined.

- **Numerical solver parameters**

These parameters allow the user to specify the choice of matrix solver and preconditioner, as well as its convergence criteria, like the maximum number of iterations, the minimum error criteria, and the type of norm used to compute those. These parameters also include the nonlinear Picard iteration convergence criteria. In addition, machine dependent criteria can be specified, such as machine precision, smallest and largest real floating point numbers, etc.

- **Limitations**

- The geometry of the 3D domain is rectangular (however, in 2D, the bedrock is specified as  $Z_{INF}(x,y)$ )
- The finite volume grid is rectangular, uniform, cartesian (similarly in 2D and in 3D)

- Some useful features such as leaky layers in the 2D case are not yet implemented
- The time step adaptivity and the nonlinear solution process are not always successful (a problem common to most computer models for highly nonlinear and transient problems)

#### B.4 - BIGFLOW - Numerical methods

BF is based on a fully implicit finite volume formulation of flux divergence equations in conservative form (mixed formulation), and it can solve transient as well as steady state problems (either by time marching or in a single infinite time step). It implements strong implicit coupling of different types of hydrologic flows via a single generic equation (e.g. coupled stream-aquifer flow, macroporous media with quadratic head loss law, perched groundwater with multiple free surfaces, etc). The «computational kernel» of the code has inherited features of previous versions and has been extensively tested, particularly for 3D saturated/unsaturated flow problems with randomly heterogeneous properties. The «kernel» is characterized by extremely sparse, specialized linear algebra based on preconditioned conjugate gradient solvers, interlooped with a robust modified Picard (fixed point) iteration scheme for nonlinear problems.

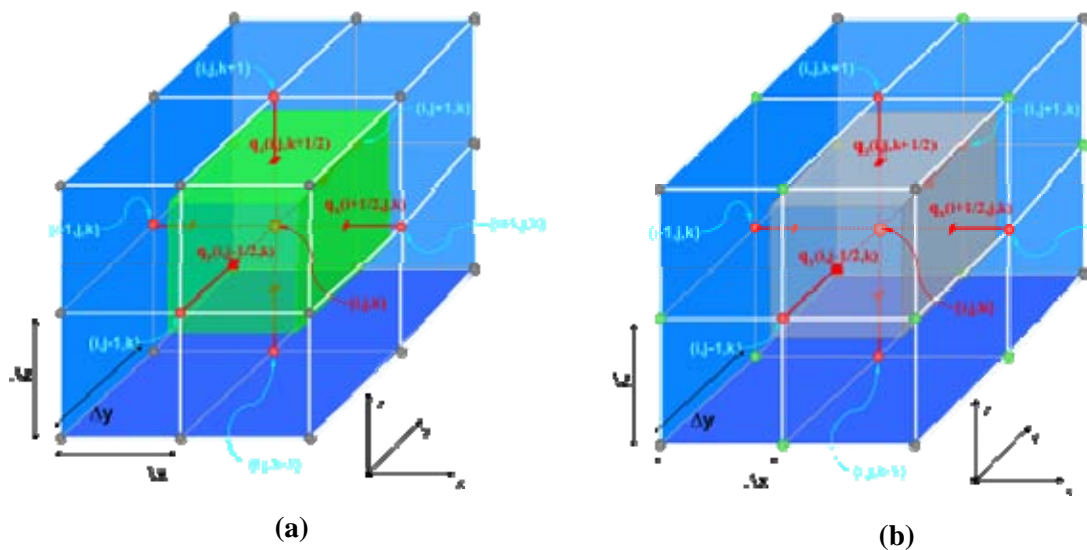


Figure 4 Bigflow stencil (a) for Darcy model (b) for Darcy Forcheimer quadratic loss model (notice the used green cells in that case)



## B.5 - BF-Py 2.0 (BigFlow - Python version 2.0) modelling platform

A graphical user interface under Python<sup>®6</sup> and using the wxPython<sup>®</sup> library has been developed for pre and post processing. Since the Python language is cross-platform, the interface is available on virtual all operating systems. Part of the interface has been programmed during the WP3.1 of SWIMED project.

The objective of the GUI (Graphical User Interface) is not to supply a commercial software package for BIGFLOW, but to provide BIGFLOW users with a tool to manage the model inputs and outputs for more efficient usage. This is mostly important for problems with complex geometry, but also, for optimisation problems and multiple scenario analyses.

The Python interface manages directories and files with minimal user intervention. It also enables users to input simulation parameters like BC's, grid size, time step, convergence criteria, initial head distribution, etc. Simulations are launched and tracked in real-time by numerical and graphical outputs: see for example **Figure(5 & 6)** below. Outputs are also managed by the Python application; they can be plotted and exported in different graphical formats. Multiple simulations can be launched and managed interactively, for example Monte-Carlo simulations for stochastic uncertainty analyses, or iterative re-starts as occurred in the sigma-homotopy method <sup>7</sup>.

The Python interface is intended to be a platform for hydrological modelling. In the latest version the interface now has incorporated

- a 3D conditional random media generator (XiMUL) (Ababou et al.)

- a discrete random object generator (Bailly et al.)

- a particule tracking code LPT3D (Ababou et al.)

The interface enables 3D visualization using the VTK library and the MayaVi interface. Additionally GIS importing and exporting capabilities has been implemented.

---

<sup>6</sup> Python is a Freeware, interpreted, Object Oriented Programming Language. <<http://www.python.org>>  
wxPython is a Freeware, GUI toolkit for the Python programming language based on wxWindows.

<sup>7</sup> Note: the latter method is an iterative continuation method with respect to the  $\sigma$  parameter, where  $\sigma$  represents the degree of heterogeneity (standard deviation of  $\ln K$ ); the method was developed during the WP 3.1 and was used to model seawater intrusion in highly heterogeneous stochastic aquifers.

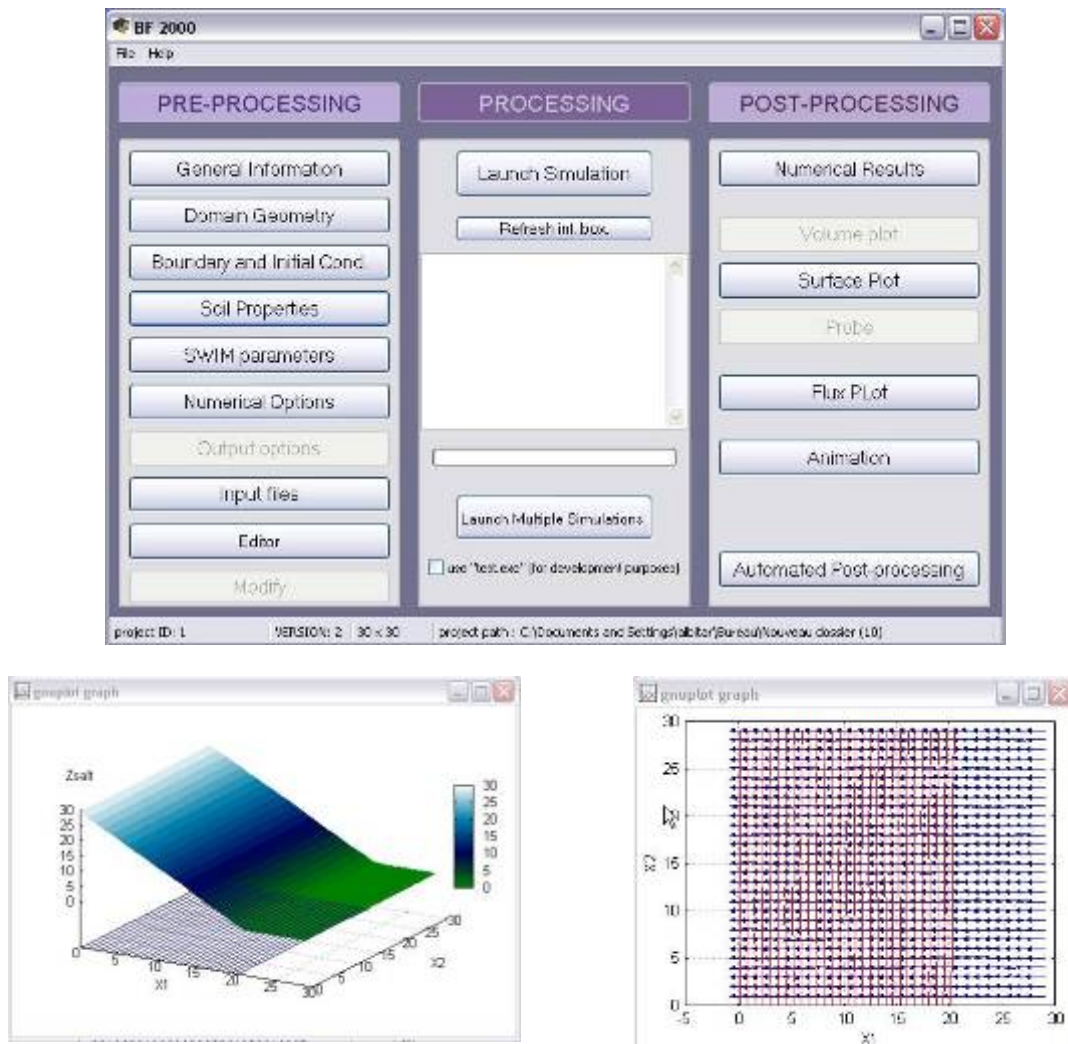
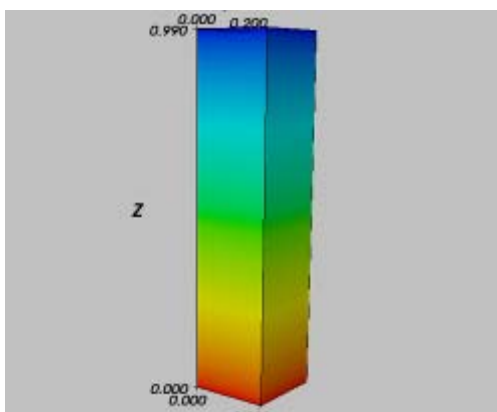
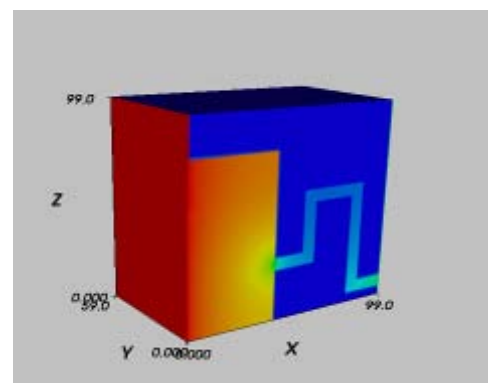


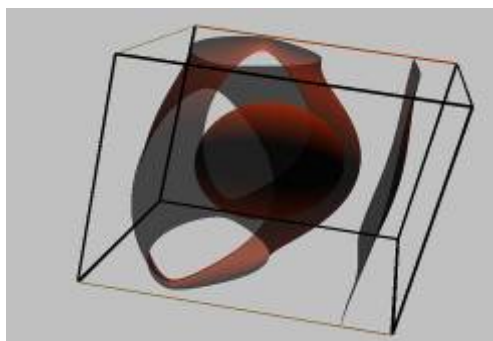
Figure 5 : Illustration of the Python menu-driven and graphical interface of BigFlow.



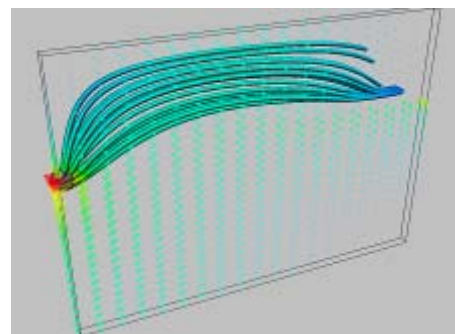
Unsaturated column example: pressure distribution



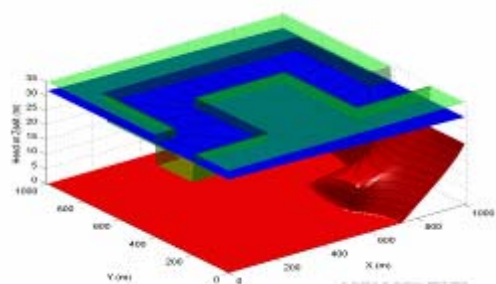
Water tank modelling using the macro porous media approach



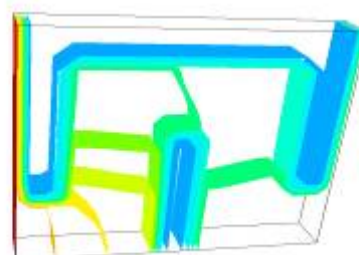
**Source term modelling: contours of the head field**



**Unsaturated aquifer modelling: Vector plot of fluxes and streamlines**



**2D coupled surface water & GW with seawater intrusion: surface visualisation (green= topo., red = saltwater /water interface, blue = water level)**



**Water tank modelling: isosurfaces of water pressure**

Figure 6: modelling examples performed by the new BF-Py platform

## ANNEXE C Memory requirements of BIGFLOW 2D SWIM

### C.1 - Total Array Size

In BIGFLOW (ref, RA 1993) all arrays are assembled in a total array. The total array is dynamically allocated in the code. Its size changes depending on domain size and simulation options. If an array is not used in a simulation its size will be reduced to minimal value (e.g. (1,1,1) since all data arrays are three dimensional in BIGFLOW), the size of total array needed is then reduced. This feature has been conserved in later versions of BIGFLOW namely BF2000 and BFSWIM.

An estimate of the size of total array is set by the user before each compilation. This estimate should be greater or equal to the effective size of the total array, but not much greater. Since this will reduce performance and increase memory requirements.

### C.2 - Memory Requirement

The array size set before compilation defines the memory requirements of the code. The reserved memory is than the product of the integer size and the total array dimension.

For a simple precision calculation the integer size is 4 bytes and for double precision its 8 bytes. The used Random Access Memory RAM is than:

$$\text{Required RAM in Kb} = \text{ABIG} \times I / 1024$$

with ABIG: total array size  
I : integer size

This value is limited by two features: the system RAM capacity and the reserved STACK. The system RAM is an intrinsic feature of the PC or the station. As for the STACK it's the maximum reserved memory in the compilation options. The reserved STACK shouldn't exceed system RAM and not less than the required RAM value.

### C.3 - Number of Nodes

Since edge nodes are only considered for initial mid nodal fluxes and do not intervene in computation, the effective number of nodes is therefore obtained by:

$$Nt = \prod_{i=1}^3 (Ni - 2)$$

with Ni : number of grid nodes in direction i

- **Relation between number of nodes and total array or memory requirements**

This relation is essential to optimize the size of total array depending on type of simulation.

It is linear when the domain has small boundary conditions arrays compared to 3D data arrays. Using series of compilations and simulations, the linear relations were deduced for several types of simulations using minimal number of data arrays. This relation can then be generalized for other simulation options by adding 1 to the slope coefficient for each added array. But it can't take into account time dependent parameters or variables.

### C.4 - BFSWIM 2D Memory Requirements

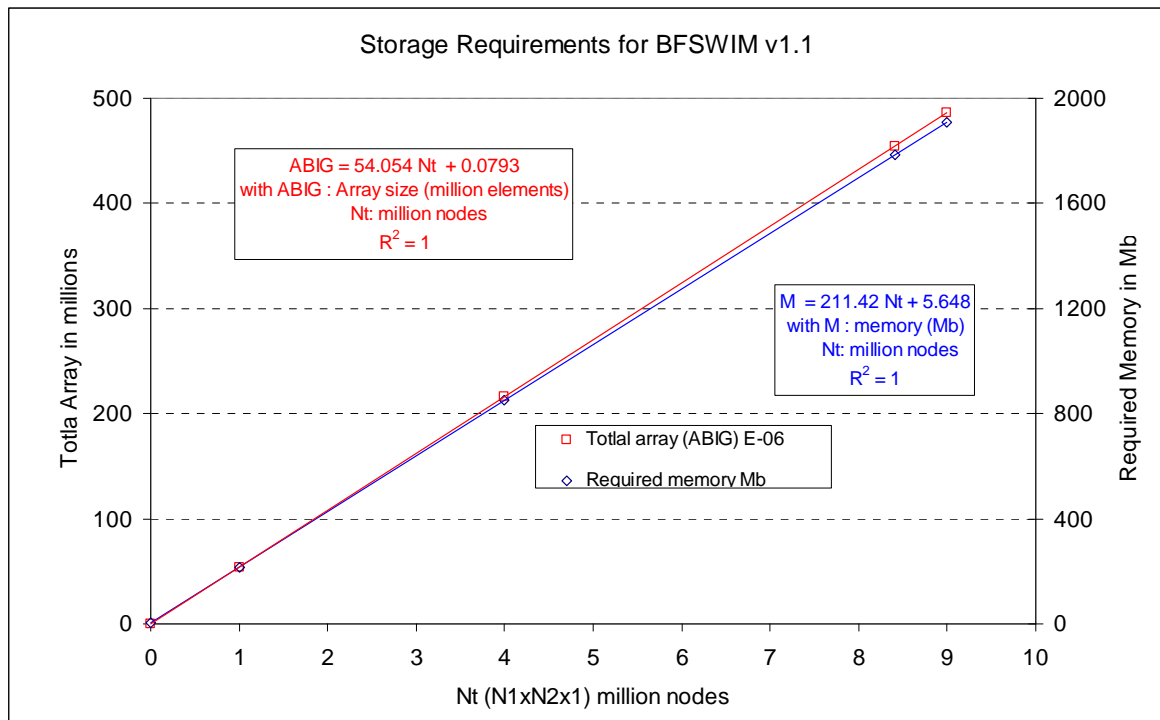
Figure 1 illustrates the fitted function and the corresponding correlation coefficient for 2D sharp interface salt water intrusion modeling (BFSWIMv1.1). The total array size is :

$$ABIG = 54.05 N_t + 0.0793$$

with ABIG in million elements and  $N_t$  in million nodes

the memory requirement using single precision is :

$$RAM (Kb) = 211.4 N_t + 5.648$$



## ANNEXE D Spectral/Fourier Analysis and Up-scaling

### D.1 - 1-Spectrale Fourier analysis

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} - \frac{\partial f}{\partial x} J = 0 \text{ avec } J = -\partial H / \partial x \text{ (on néglige les termes de second ordre)}$$

We now use the spectral/Fourier representation of the stochastic process :

The Fourier –Stieltjes theorem applied for a statistically homogeneous variable gives :

$$\varphi = \int_{R^N} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x})} dZ_{\varphi}(\mathbf{k}) \quad \varphi = \int_{-\infty-\infty}^{+\infty+\infty} \int_{-\infty-\infty}^{+\infty+\infty} e^{i(kx)} dZ_{\varphi}(k)$$

$$f = \int_{R^N} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x})} dZ_f(\mathbf{k}) \quad f = \int_{-\infty-\infty}^{+\infty+\infty} \int_{-\infty-\infty}^{+\infty+\infty} e^{i(kx)} dZ_f(k)$$

where  $dZ_{\varphi}$   $dZ_f$  are Fourier increments and  $\mathbf{k}$  wave vector

The Spectral/Fourier transform implies the unicity of the transform and the orthogonality  
The unicity of the Fourier representation gives:

$$dZ_{\varphi}(k) = \frac{-ik_1 J}{(k_1 + k_2)^2} dZ_f(k)$$

The orthogonality of the representation gives :

$$\langle dZ_X(k) dZ_X(k)^* \rangle = \delta(k'-k'') S_{XX}$$

From the past two hypothesis we get :

$$S_{\varphi\varphi}(k) dk = E(dZ_{\varphi} dZ_{\varphi}^*) = \frac{k_1^2 J^2}{(k_1^2 + k_2^2)^2} S_f(k) dk$$

The Weiner-khinchine theorem gives the relation between the spectral density function and the correlation by:

$$S_{\varphi\varphi}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi^N} \int_{R^N} e^{-i\mathbf{k}\boldsymbol{\tau}} R_{\varphi\varphi}(\boldsymbol{\tau}) d\boldsymbol{\tau}$$

Replacing the correlation function considered her is:

$$R(\tau) = \sigma^2 \left[ \frac{\pi\tau}{4\lambda} K_1\left(\frac{\pi\tau}{4\lambda}\right) - \frac{1}{2} \left(\frac{\pi\tau}{4\lambda}\right)^2 K_0\left(\frac{\pi\tau}{4\lambda}\right) \right]$$

Replacing this function in the Weiner-khinchine relation gives:

$$\sigma_\Phi = \frac{8}{\pi^2} \sigma_{\ln K} \lambda_{\ln K} J_x$$

where  $J_x$  is the mean  $\Phi$ -gradient denoted “a” in this paper. The values of a are given in the following table:

<i>sigma(ln(k))</i>	<i>L</i>	<i>a=d(phi)/dx</i>
<b>0</b>	<b>581</b>	<b>1.5461</b>
<b>1.15</b>	<b>640</b>	<b>1.4036</b>
<b>1.32</b>	<b>690</b>	<b>1.3019</b>
<b>2.312519</b>	<b>701</b>	<b>1.2815</b>
<b>2.684751</b>	<b>704</b>	<b>1.2760</b>
<b>2.988887</b>	<b>705</b>	<b>1.2742</b>
<b>3.246030</b>	<b>706</b>	<b>1.2724</b>
<b>3.46877</b>	<b>706</b>	<b>1.2724</b>
<b>3.665255</b>	<b>706</b>	<b>1.2724</b>
<b>3.841010</b>	<b>706</b>	<b>1.2724</b>
<b>4.00</b>	<b>706</b>	<b>1.2724</b>

## D.2 - Empirical upscaling of $Z_{SALT}$

In this paragraph we use an empirical upscaling technique for the saltwater/freshwater interface. The upscaling is considered with reference to the total water flux

$$\hat{Q} = \frac{-\hat{K}_p}{2L} \left( H_1^2 - Z_{SALT}^2 (\varepsilon + 1) + 2 \varepsilon \Delta Z Z_{SALT} \right)$$

The power average model (Ababou, 1994) for the empirical upscaling technique is then used. This is given by the following formula:

$$\hat{K}_p = E(K^p)^{1/p}$$

with p=directional averaging exponents

$$p = 1 - \frac{2}{D} \frac{\lambda_h}{\lambda_i}$$

D space dimintions

$\lambda_i$ =directional fluctuation scales

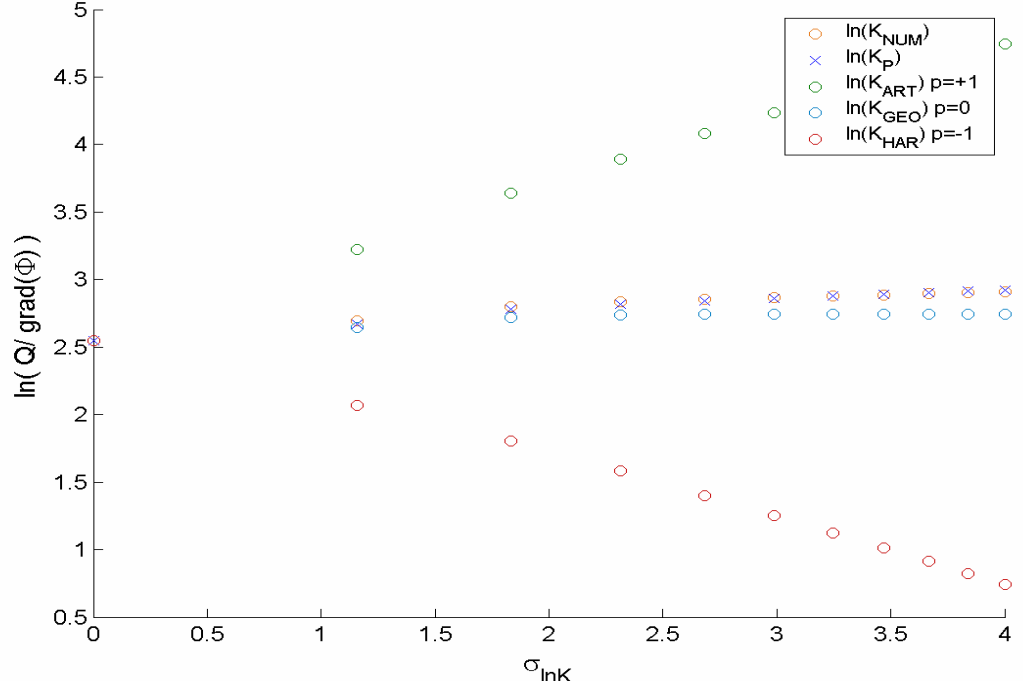
$\lambda_h$ =D-dimentional harmonic mean fluctuation scale

$$\lambda_h = \left[ \frac{1}{D} \sum_{i=1}^D \lambda_i^{-1} \right]^{-1}$$

For a Gaussian field the equivalent permeability is given by:

$$\hat{K}_p = E(K^p)^{1/p} = K_G \exp\left(\frac{1}{2} p \sigma_y^2\right)$$

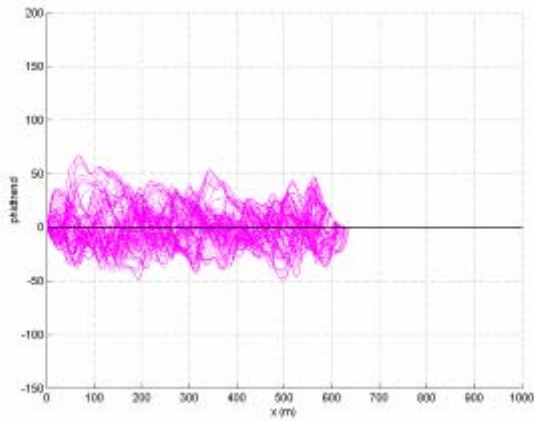
Results are shown in figure below. The numerical results (x) are plotted against the analytical results ( ) for different values of p (p=-1,0, 0.08, 1). The best fitted value of P is 0.01. This shows a small deviation from the geometric mean.



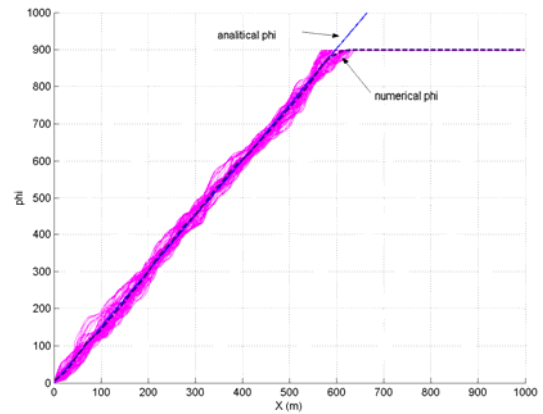
Other values of interest for the stochastic analytical model are shown in this table.



### D.3 - Results of the stochastic analysis and simulations



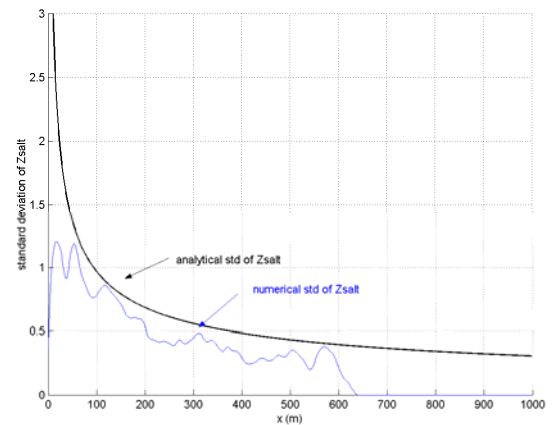
Axial transects of fluctuations around the mean of  $\Phi_{SALT}$  (see previous figure); simulation on 1000x1000 grid for  $\sigma = 1.0$ .



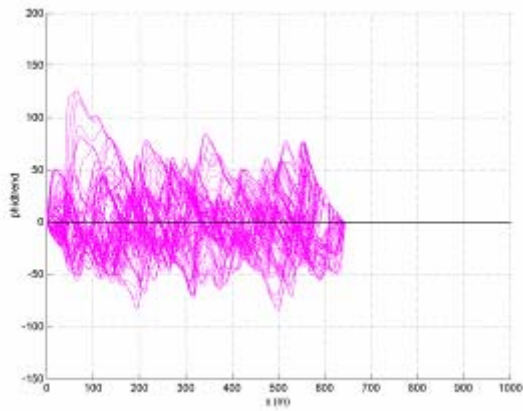
One hundred transects of  $\Phi_{SALT}$  (transformed from ZSALT); “analytical mean” curve  $\Phi_{SALT}$  (homogeneous aquifer); and “numerical mean” curve  $\Phi_{SALT}$  (mean of  $\Phi_{SALT}$  sampled shorewise along “y”). The sea shore is at left. Grid: 1000x1000. Heterogeneity:  $\sigma = 1.0$ .



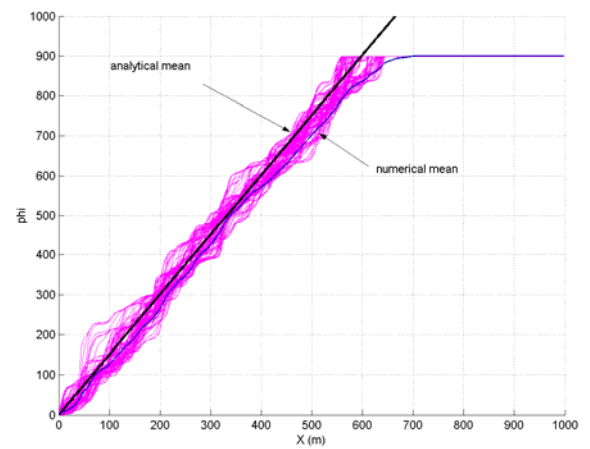
std of the transformed of the transform  $\Phi_{SALT}$  (see previous figure); simulation on 1000x1000 grid for  $\sigma = 1.0$ .



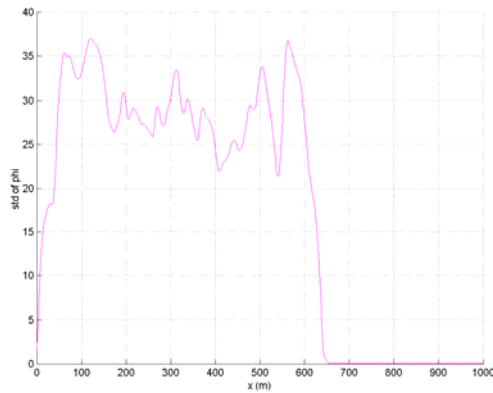
Numerical and theoretical  $\sigma Z_{salt}$  vs distance from sea (x) for  $\sigma \ln K = 1.0$ .



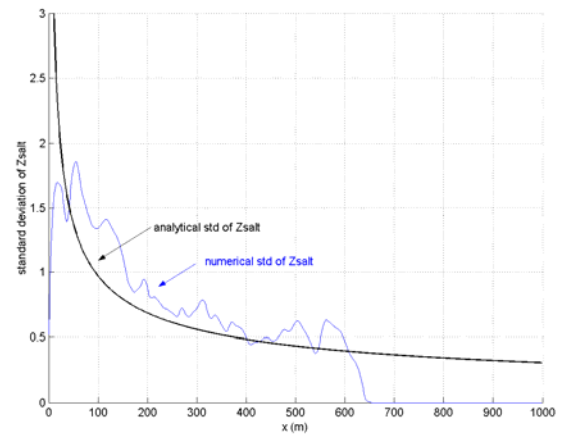
Axial transects of fluctuations around the mean of  $\Phi\text{SALT}$  (see previous figure); simulation on  $1000 \times 1000$  grid for  $\sigma = 1.66$ .



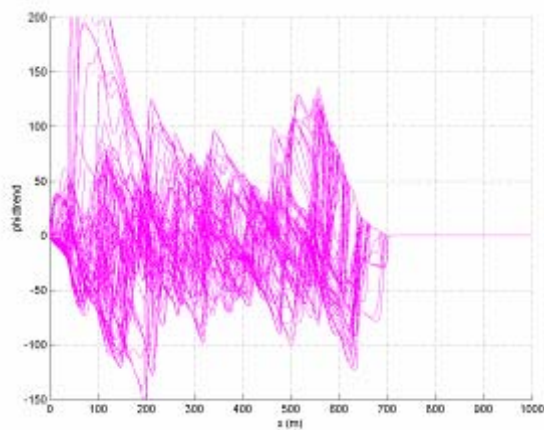
One hundred transects of  $\Phi\text{SALT}$  (transformed from  $\text{ZSALT}$ ); "analytical mean" curve  $\Phi\text{SALT}$  (homogeneous aquifer); and "numerical mean" curve  $\Phi\text{SALT}$  (mean of  $\Phi\text{SALT}$  sampled shorewise along "y"). The sea shore is at left. Grid:  $1000 \times 1000$ . Heterogeneity:  $\sigma = 1.66$ .



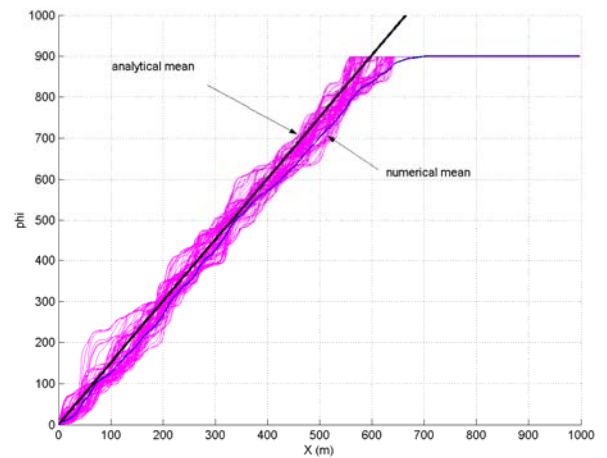
std of the transformed of the transform  $\Phi\text{SALT}$  (see previous figure); simulation on  $1000 \times 1000$  grid for  $\sigma = 1.66$ .



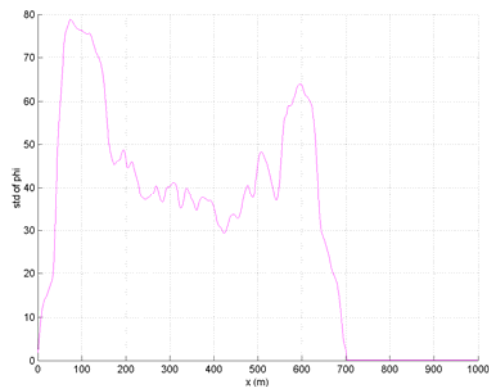
Numerical and theoretical  $\sigma\text{Zsalt}$  vs distance from sea ( $x$ ) for  $\sigma\ln K = 1.66$ .



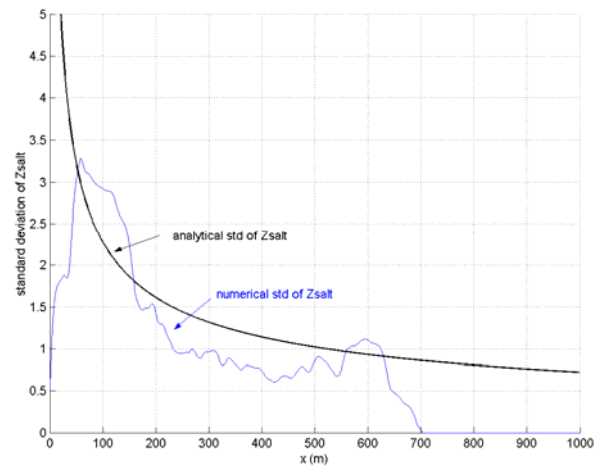
Axial transects of fluctuations around the mean of  $\Phi\text{SALT}$  (see previous figure); simulation on 1000x1000 grid for  $\sigma = 2.0$ .



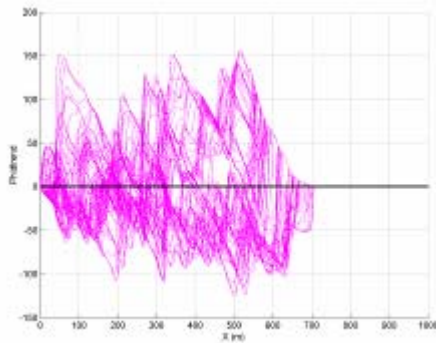
One hundred transects of  $\Phi\text{SALT}$  (transformed from  $Z\text{SALT}$ ); “analytical mean” curve  $\Phi\text{SALT}$  (homogeneous aquifer); and “numerical mean” curve  $\Phi\text{SALT}$  (mean of  $\Phi\text{SALT}$  sampled shorewise along “y”). The sea shore is at left. Grid: 1000x1000. Heterogeneity:  $\sigma = 2.0$ .



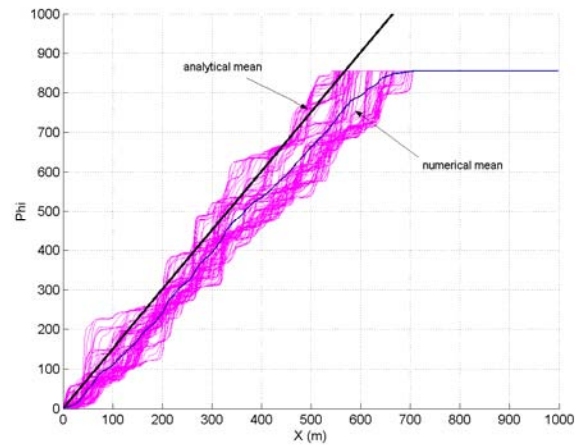
std of the transformed of the transform  $\Phi\text{SALT}$  (see previous figure); simulation on 1000x1000 grid for  $\sigma = 2.0$ .



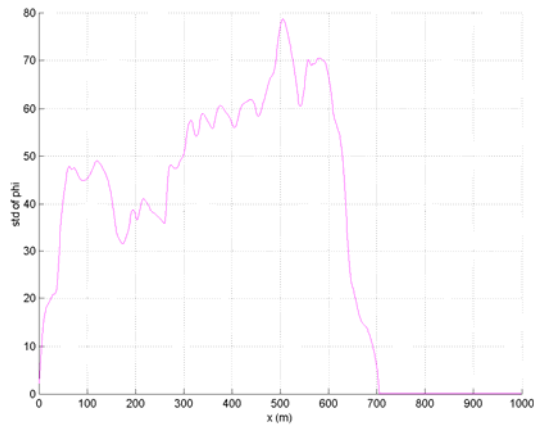
Numerical and theoretical  $\sigma Z_{\text{salt}}$  vs distance from sea (x) for  $\sigma \ln K = 2.0$ .



Axial transects of fluctuations around the mean of  $\Phi_{\text{SALT}}$  (see previous figure); simulation on 1000x1000 grid for  $\sigma = \ln(10)$ .



One hundred transects of  $\Phi_{\text{SALT}}$  (transformed from  $Z_{\text{SALT}}$ ); “analytical mean” curve  $\Phi_{\text{SALT}}$  (homogeneous aquifer); and “numerical mean” curve  $\Phi_{\text{SALT}}$  (mean of  $\Phi_{\text{SALT}}$  sampled shorewise along “y”). The sea shore is at left. Grid: 1000x1000. Heterogeneity:  $\sigma = \ln(10)$ .



std of the transformed of the transform  $\Phi_{\text{SALT}}$  (see previous figure); simulation on 1000x1000 grid for  $\sigma = \ln(10)$ .



Numerical and theoretical  $\sigma_{Z_{\text{SALT}}}$  vs distance from sea (x) for  $\sigma_{\ln K} = \ln(10)$ .

